

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
імені І. І. МЕЧНИКОВА

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE  
OF UKRAINE  
ODESSA I. I. MECHNIKOV NATIONAL  
UNIVERSITY

**Фізика  
аеродисперсних  
систем**

**Physics  
of aerodisperse  
systems**

**ВИПУСК**

**55**

**VOLUME**

Науковий збірник

Collection of papers

***Засновано в 1969 р.***

***Founded in 1969***

**Одеса  
ОНУ  
2018**

Приведено результати досліджень тепло- і масообміну в дисперсних системах при протіканні фазових і хімічних перетворень, механізмів утворення дисперсної фази, фізики горіння різноманітних речовин, критичні умови займання та погасання. Особливо розглядається газодинаміка процесів переносу дисперсної фази. Представлено результати досліджень електрофізики дисперсних систем і нелінійних процесів, які протікають в димовій плазмі.

Видання призначено для науковців, які вивчають процеси в аеродисперсних системах, зокрема аерозолях. Воно має бути корисним для студентів та аспірантів фізичних, фізико-технічних, енергетичних і хімічних факультетів, які спеціалізуються в області теплофізики дисперсних систем і фізики плазми, хімічної фізики та гідродинаміки.

**Редакційна колегія:**

д. ф.-м. н., професор	<b>Калінчак В. В.</b> (Україна)	(головний редактор)
д. ф.-м. н., професор	<b>Алтоїз Б. А.</b> (Україна)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Асланов С. К.</b> (Україна)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Асвовський І. Г.</b> (Росія)	
Ph.D., профессор	<b>Гриншпун С. А.</b> (США)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Драган Г. С.</b> (Україна)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Контуш С. М.</b> (Україна)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Копит М. Х.</b> (Україна)	
Ph.D., профессор	<b>Новак Войцех</b> (Польща)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Полетасв М. І.</b> (Україна)	
д. ф.-м. н., професор	<b>Шевчук В. Г.</b> (Україна)	
д. х. н., професор	<b>Еннан А. А.-А.</b> (Україна)	
к. ф.-м. н., доцент	<b>Орловська С. Г.</b> (Україна)	(відп. секретар)
к. ф.-м. н., доцент	<b>Черненко О. С.</b> (Україна)	(техн. секретар)
к. ф.-м. н.	<b>Даракков Д. С.</b> (Україна)	(техн. секретар)
	<b>Красотова Л. М.</b> (Україна)	(техн. секретар)

Друкується згідно з рішенням Вченої ради ОНУ  
від 30 жовтня 2018 р.

Включено до Переліку наукових профільних видань України згідно з наказом Міністерства освіти і науки України № 1279 від 6 листопада 2014 року.

**Адреса редакційної колегії:**

65082, Одеса, вул. Пастера, 27,

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова,  
кафедра загальної фізики та фізики теплоенергетичних і хімічних процесів,  
тел. 048 / 723-12-03, 723-62-27

Адреса в Інтернеті: <http://fas.onu.edu.ua>

E-mail: [teplophys@onu.edu.ua](mailto:teplophys@onu.edu.ua), [svetor25@gmail.com](mailto:svetor25@gmail.com), [chernalex@ukr.net](mailto:chernalex@ukr.net)

UDK 532 + 533.9 + 536 + 537.5 + 622.61

The journal publishes results of studies in the field of heat and mass transfer in disperse systems during phase changes and chemical reactions, mechanisms of dispersed phase formation. Combustion of solid, liquid and gaseous fuels is analyzed, critical conditions of ignition and extinction are considered. Gas-dynamic phenomena that determine a transport of dispersed phase are considered. Studies of electrophysics of disperse systems and non-linear processes in dusty plasma are presented. The journal is intended for scientists and engineers in field of disperse systems and, in particular, aerosols. Also it will be useful for students and PhD students of physical, physical-technical, energy and chemical faculties, specializing in thermal and plasma physics of dispersed systems, chemical physics and hydrodynamics.

*Editorial Board:*

<b>Kalinchak V. V.</b> (Ukraine)	(Editor-in-Chief)
<b>Altoiz B. A.</b> (Ukraine)	
<b>Aslanov S. K.</b> (Ukraine)	
<b>Assovsky I. G.</b> (Russia)	
<b>Dragan G. S.</b> (Ukraine)	
<b>Ennan A. A.-A.</b> (Ukraine)	
<b>Grinshpun S. A.</b> (USA)	
<b>Kontush S. M.</b> (Ukraine)	
<b>Kopyt N. Kh.</b> (Ukraine)	
<b>Nowak Wojciech</b> (Poland)	
<b>Poletaev N. I.</b> (Ukraine)	
<b>Shevchuk V. G.</b> (Ukraine)	
<b>Orlovskaya S. G.</b> (Ukraine)	(Assistant Editor)
<b>Chernenko A. S.</b> (Ukraine)	(technical Secretary)
<b>Darakov D. S.</b> (Ukraine)	(technical Secretary)
<b>Krasotova L. N.</b> (Ukraine)	(technical Secretary)

The journal is published on the decision of the Academic Council of  
Odessa I. I. Mechnikov National University of 30 October 2018

The journal is included in the list of scientific specialized editions of Ukraine according to the Ministry of Education and Science of Ukraine order № 1279, November 6, 2014.

***Address of the Editorial Board:***

65082, Odessa, Paster str. 27,  
Odessa I. I. Mechnikov National University,  
Department of general physics and physics of thermoenergetical and chemical  
processes  
Phone 048 / 723-12-03, 723-62-27  
Internet address: <http://fas.onu.edu.ua>  
E-mail: [teplophys@onu.edu.ua](mailto:teplophys@onu.edu.ua), [svetor25@gmail.com](mailto:svetor25@gmail.com), [chernalex@ukr.net](mailto:chernalex@ukr.net)

## ЗМІСТ

### ТЕПЛОФІЗИКА ДИСПЕРСНИХ СИСТЕМ

- Шут М. І., Рокицький М. О., Рокицька Г. В., Шут А. М., Стасюк І. М.*  
Теплофізичні властивості полімерних композиційних матеріалів на основі пентапласту і вуглецевих нанотрубок 8
- Щекатолина С. А., Жарюк В. Н.*  
Обмен липидами между липопротеинами низкой и высокой плотности с учетом окисления липопротеинов низкой плотности 14
- Zhou Huiyu, Dragan G. S., Kutarov V. V., Galkin N. B., Filipova T. O.*  
Universal description of the biofilms growth Dynamic in logistic model 30
- Popovskii A.Yu., Altoiz B.A., Butenko A.F.*  
Structural characteristics of the epitropic liquid-crystalline layer of oleic acid 37

### ТЕПЛОМАСООБМІН

- Черненко А. С., Корчагина М. Н., Калинин В. В.*  
Зажигание и горение частиц древесного угля в азотно-кислородных смесях комнатной температуры. Часть II. Аналитическое обоснование 45
- Orlovskaya S. G., Liseanskaia M. V.*  
The oxide structures formation on the surface of tungsten 54

### ФІЗИКА ГОРІННЯ

- Стариков М.А., Хлебникова М. Е., Буланин Ф. К., Сидоров А. Е., Полетаев Н. И., Шевчук В. Г.*  
Горение диспергированного жидкого и твердого топлива в присутствии электрических разрядов 59
- Калинчук В. В., Черненко О. С., Сікорський М. В., Бритавський Е. В., Стукалов С. А.*  
Експериментальні дослідження безполум'яного горіння газових сумішей з домішками аміаку, водню та ацетону на платиновому дротіку 71
- Буланин Ф. К., Сидоров А. Е., Кіро С. А., Полетаев Н. И., Шевчук В. Г.*  
Критические условия воспламенения газозвеси энергоемких соединений 80

## ГАЗОДИНАМІКА

*Buyadzhі V. V., Sofronkov A. N., Glushkov A. V., Khetselius O. Yu.,  
Dubrovskaya Yu. V., Svinarenko A. A.*

New energy, angle momentum and entropy balance approach to modelling climate and macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass transfer at macroscale. I. General Formalism

95

*Sofronkov A.N., Khetselius O.Yu., Glushkov A.V.,  
Buyadzhі V.V., Romanova A.V., Ignatenko A.V.*

New geophysical complex-field approach to modelling dynamics of heat-mass-transfer and ventilation in atmosphere of the industrial region

104

## ЕЛЕКТРОФІЗИКА

*Вишняков В. И., Киро С. А., Кабаненко Р.В.*

Методика зондовой диагностики плазмы сварочного аэрозоля

112

*Драган Г. С., Колесников К. В., Кутаров В. В.*

Температурный профиль сферического объема плазмы с учетом рекомбинационных процессов

121

## ФІЗИКА АЕРОЗОЛІВ

*Вишняков В. И., Опря М. В., Эннан А. А.-А.*

Влияние щелочной присадки в защитном газе на дисперсный состав сварочного аэрозоля

126

*Шингарёв Г.Л., Контущ С.М., Скапцов А.С.*

Малоинерционный способ управления полями температур и пересыщений в термодиффузионных камерах. Опыты по исследованию диффузиофореза

139

*Киро С. А., Опря М. В., Эннан А. А.-А.*

Влияние параметров режима электродуговой сварки в защитном газе на дисперсный и химический состав частиц сварочного аэрозоля

149

## ПРИЛАДИ І МЕТОДИ ВІМІРЮВАННЯ

*Контущ С.М., Ахмеров А.Ю., Мандель В.Е., Чурашов В.П.*

Пневматический генератор струи монодисперсных капель

158

*Іменний покажчик .....*

167

*Правила для авторів .....*

169

## CONTENTS

### THEMAL PHYSICS OF DISPERSE SYSTEMS

- Shut M.I., Rokytskyi M.O., Rokytska H.V., Shut A.M., Stasiuk I.M.*  
Thermophysical properties of polymer composite materials based on penton and carbon nanotubes 8
- Tchekatolina S. A., Garyuk V. N.*  
Lipid exchange between lipoproteins of low and high density taking into account the oxidation of low-density lipoproteins 14
- Zhou Huiyu<sup>1</sup>, Dragan G.S.<sup>2</sup>, Kutarov V.V.<sup>2</sup>, Galkin N.B.<sup>2</sup>, Filipova T.O.<sup>2</sup>*  
Universal description of the biofilms growth dynamic in logistic model 30
- Popovskii A.Yu., Altoiz B.A., Butenko A.F.*  
Structural characteristics of the epitropic liquid-crystalline layer of oleic acid 37

### HEAT AND MASS TRANSFER

- Chernenko A.S., Korchagina M.N., Kalinchak V.V.*  
Ignition and combustion of charcoal particles in nitrogen-oxygen mixtures at room temperature. Part II Analytic justification 45
- Orlovskaya S. G., Liseanskaia M. V.*  
The oxide structures formation on the surface of tungsten 54

### COMBUSTION PHYSICS

- Starikov M.A., Khlebnikova M.E., Bulanin Ph.K., Sidorov A.E., Poletaev N.I., Shevchuk V.G.*  
Dispersed liquid and solid fuels combustion in an electrical discharge presence 59
- Kalinchak V.V., Chernenko A.S., Sikorsky M.V., Brytavsky E.V., Stukalov S.A.*  
Experimental studies of the flameless combustion of gas mixtures with impurities of ammonia, hydrogen and acetone on a platinum wire 71
- Bulanin Ph., Sidorov A., Kiro S., Poletaev N., Shevchuk V.*  
Critical conditions of energy intense compaunds aerosuspensions ignition 80

## **GAS-DYNAMICS**

- Buyadzi V.V., Sofronkov A.N., Glushkov A.V.,  
Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Svinarenko A.A.*  
New energy, angle momentum and entropy balance approach to model-  
ling climate and macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass  
transfer at macroscale. I. General Formalism 95
- Sofronkov A. N., Khetselius O. Yu., Glushkov A. V.,  
Buyadzi V. V., Romanova A. V., Ignatenko A. V.*  
New geophysical complex-field approach to modelling dynamics of  
heat-mass-transfer and ventilation in atmosphere of the industrial region 104

## **ELECTROPHYSICS**

- Vishnyakov V. I., Kiro S.A., Kabanenko R.V.*  
Technique of probe diagnostics in the welding fume plasma. 112
- Dragan G.S., Kolesnikov K.V., Kutarov V.V.*  
Temperature profile of a spherical plasma volume, taking into account  
recombination processes 121

## **AEROSOLS PHYSICS**

- Vishnyakov V.I., Oprya M.V., Ennan A. A.-A.*  
Effect of alkaline additional agent in shielding gas on disperse  
composition of welding fume. 126
- Shynharov G.L., Kontush S.M., Skaptsov A.S.*  
A low inertia way of controlling the temperature and supersaturations  
fields in the thermodiffusion chambers. Experiments for research of the  
diffusiophoresis. 139
- Kiro S.A., Oprya M.V., Ennan A.A.*  
Influence of the gas metal arc welding regime parameters on the disperse  
and chemical composition of the welding fume particles 149

## **INSTRUMENTS AND MEASUREMENT METHODS**

- Kontush S.M., Akhmerov O.Yu., Mandel V.Yu., Churashov V.P.*  
Pneumatic jet generator of monodisperse drops 158
- Name index.....* 168
- Rules for authors.....* 171

---

---

## ТЕПЛОФІЗИКА ДИСПЕРСНИХ СИСТЕМ

---

---

УДК: 536.42:[678.046.9:621.3.035.221.642]

**Шут М. І., Рокицький М. О., Рокицька Г. В., Шут А. М., Стасюк І. М.**

*НПУ імені М.П. Драгоманова, м. Київ, Україна  
01601, вул. Пирогова, 9, Київ, Україна  
E-mail: maksal@bigmir.net*

### **Теплофізичні властивості полімерних композиційних матеріалів на основі пентапласту і вуглецевих нанотрубок**

*Проведені дослідження температурних залежностей питомої теплоємності та тангенса кута механічних втрат  $\text{tg}\delta = f(T)$  систем пентапласт – AgI та пентапласт – ВНТ. Виконано розділення бімодальних залежностей  $c_p = f(T)$  на складові. Проаналізовано низькотемпературні релаксаційні процеси ( $\beta$ -процеси релаксації), процеси сгудвання ( $\alpha$ -процеси релаксації) і повільні високотемпературні переходи ( $\lambda$ - та  $\phi$ -процеси релаксації), що відбуваються у полімерній матриці композиційних матеріалів.*

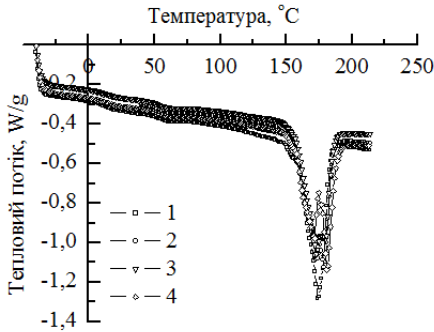
**Постановка задачі.** Як відомо, додавання дисперсних наповнювачів в полімерні матеріали викликає широкий комплекс явищ і ефектів, виникнення яких обумовлено впливом модифікаторів на структуру полімерних композиційних матеріалів (ПКМ). Залежно від властивостей наповнювачів їх модифікуючий вплив на властивості ПКМ є різним. **Метою даної роботи** було з'ясування впливу наповнювачів різної природи на теплофізичні властивості ПКМ на основі високостабільного та хімічно стійкого високомолекулярного полієфіру – пентапласту (3,3-бис(хлорметил)оксациклобутан) [1].

В якості наповнювачів були використані суперіонний матеріал - йодид срібла (AgI) [2] з розмірами частинок  $1 \div 6$  мкм з формою, подібною прямокутного паралелепіпеда із співвідношенням сторін 1:1:3 і 1:1:2 і кислотно очищені від мінеральних домішок багаточарові вуглецеві нанотрубки (ВНТ) з зовнішнім діаметром  $10 \div 40$  нм, питомою поверхнею  $200 \div 400$  м<sup>2</sup>/г і питомим електричним опором  $0,05 \div 0,1$  Ом·см.

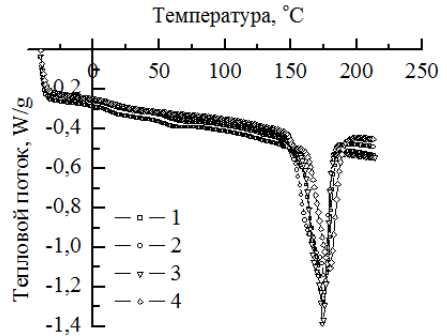
Зразки систем пентапласт - AgI і пентапласт - ВНТ готували в наступному термо-баро-часовому ( $T$ - $p$ - $t$ ) режимі: нагрівання зі швидкістю 3,5 К/хв, витримка при 483 К протягом 15 хв під тиском 20 МПа, охолодження із розплаву зі швидкістю 0.5 К/хв, що відповідає найкращим технологічними умовами переробки композиту з урахуванням властивостей як наповнювача, так і полімерної матриці.

**Аналіз результатів.** Дослідження температурних залежностей питомої теплоємності ПКМ проводилися методом диференціальної скануючої калориметрії з використанням експериментальної установки DSC Q2000 виробництва TA Instruments (США) в температурному інтервалі 233 – 493 К при різному об'ємному вмісті дисперсних наповнювачів ( $0 \leq \phi \leq 2\%$ ).





**Рис. 1.** Температурні залежності теплого потоку в полімерних нанокомпозитах системи пентапласт - ВНТ з об'ємними концентраціями наповнювача 1 – 0%; 2 – 0.2%; 3 – 0.5% і 4 – 2%, відповідно



**Рис. 2.** Температурні залежності теплого потоку в полімерних композитах системи пентапласт - AgI з об'ємними концентраціями наповнювача: 1 – 0%; 2 – 0.2%; 3 – 0.5% і 4 – 2%, відповідно

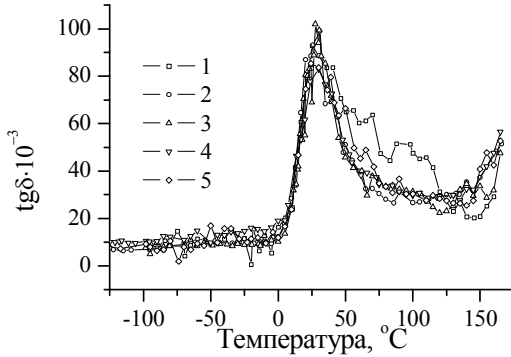
Встановлено, що температурні залежності  $c_p = f(T)$  композитів системи пентапласт - ВНТ (рис. 1) на відміну від системи пентапласт - AgI (рис. 2) характеризуються двома яскраво вираженими максимумами, один з яких спостерігається при більш низьких температурах, а інший - при більш високих [3].

Як можна бачити, внаслідок близькості температур фазових переходів пентапласт і йодиду срібла, на залежностях  $c_p = f(T)$  спостерігається накладення максимумів, яке викликає труднощі при визначенні питомої теплоти переходів. Для визначення теплоти переходів нами використана методика [4] розділу максимумів на залежностях  $c_p = f(T)$  шляхом поділу сумарного профілю на складові, що описуються нормальним розподілом Гауса або розподілом Коші.

Дана методика дозволяє виконати розділення спостережуваних при фазових перетворень теплових ефектів на два окремих процеси і окремо визначити їх параметри, дозволяє проводити розрахунки площ низькотемпературних “плечей” обох піків з подальшим визначенням теплот і температур фазових перетворень, що в свою чергу, дозволяє робити висновки про рівень фізичної взаємодії компонентів системи на межі розділу її компонентів та про характер залежності властивостей композитів від вмісту дисперсного наповнювача.

Сильний структуруючий вплив ВНТ на структуру і властивості пентапласту також підтверджується результатами досліджень температурних залежностей тангенса кута механічних втрат ( $tg\delta = f(T)$ ) композитів полімерних систем пентапласт - AgI і пентапласт - ВНТ в температурному інтервалі склування [5].

Як правило, всі релаксаційні переходи в полімерах поділяються на три групи: низькотемпературні переходи ( $\beta$ -процеси релаксації), процес склування полімеру ( $\alpha$ -процеси релаксації) і повільні високотемпературні переходи ( $\lambda$ -процеси релаксації).



**Рис. 3.** Температурні залежності тангенса кута механічних втрат в полімерних системах на основі пентапласт: 1 – чистий пентапласт 0%; 2 – пентапласт - ВНТ 0.185%; 3 – пентапласт - AgI 0.373%; 4 – пентапласт - ВНТ 0.373%; 5 – пентапласт - AgI 1.953%

$\beta$ -процеси релаксації, що відповідають руху кінетичних одиниць, що включають в себе групу атомів в ланцюгу значно менших ніж сегмент, спостерігаються на залежності  $tg\delta = f(T)$  (рис. 3) в околі температур  $-50 < T < -10$  °C. При цьому, процес характеризується двома максимумами, що відповідають  $\beta$ - і  $\beta_1$ -релаксації, які в свою чергу викликані, очевидно, розморожуванням дрібномасштабних рухів  $CH_2$  і  $CH_2Cl$  груп в складі полімерної ланцюга відповідно.

Як видно з рис. 3, чистий пентапласт характеризується наявністю яскраво виражених  $\alpha$ -процесів релаксації з максимумом на залежності  $tg\delta = f(T)$ , який відповідає 26 °C.

В роботі [6] показано, що для процесу  $\alpha$ -релаксації значення  $B \approx 5 \cdot 10^{-12}$  с, що однозначно свідчить, про те, що кінетичною одиницею в зазначених процесах є вільний сегмент. Крім  $\alpha$ -процесу релаксації, який відповідає процесу склування основної частини аморфної складової пентапласт (ступінь кристалічності чистого пентапласт складала 26% [7]), на температурній залежності  $tg\delta$  спостерігаються ще два процеси для яких значення  $B$  також мають порядок  $5 \div 5.5 \cdot 10^{-12}$  с. Таким чином, очевидно, що це  $\alpha_1$ - і  $\alpha_2$ -процеси релаксації, перший з яких може відносити до сегментальної рухливості в перехідних шарах від кристалічної до аморфної фази, а другий – до сегментальної рухливості в аморфних ділянках.

При температурах порядку  $140 \div 150$  °C і вище спостерігається деяке підвищення рівня тангенса кута механічних втрат  $tg\delta$ , що відповідає  $\lambda$ -процесу релаксації, пов'язаного з рухливістю флуктуаційних надсегментальних та надмолекулярних структур в аморфній фазі у вигляді упорядкованих та ущільнених мікрообластей (структурних мікроблоків або кластерів). Сегменти, що входять в надсегментальні та надмолекулярних структури, на відміну від

вільних сегментів є зв'язаними, і, отже, для їх активації необхідно велика енергія, що відповідає більш високій температурі.

Наповнення пентапласту дисперсними частинками AgI та ВНТ, призводить до ускладнення структури системи і призводить до виникнення додаткових релаксаційних явищ. Так, наповнений пентапласт у високоеластичному стані характеризується двома релаксаційними переходами, які обумовлені присутністю активного наповнювача. Відповідно для неперервного спектра часів релаксації при додаванні активного наповнювача з'являються два нових максимуми –  $\alpha'$  і  $\phi$ .

Перший низькотемпературний перехід (так званий  $\alpha'$ -процес) пов'язаний з сегментальною рухливістю в міжфазних шарах полімеру, адсорбованих на активному наповнювачі. Він проявляється дещо вище області склування і характеризується більш високою енергією активації, ніж процес  $\alpha$ -релаксації, що відповідає за процес склування.

Другий високотемпературний перехід ( $\phi$ -процес [8]) пояснюється рухливістю частинок активного наповнювача.

На відміну від неконцентрованих колоїдних систем з низьков'язким рідким середовищем (вода, органічні рідини), в наповнених полімерах характер їх теплового руху іншого. Частинка наповнювача, перебуваючи у в'язкопружному середовищі - полімерній матриці - здійснює коливання з власною частотою  $\nu_0$  і періодом коливань  $\theta$ . Внаслідок теплових флуктуацій час від часу частинка переміщується малими стрибками в сусідні положення рівноваги. На відміну від низькомолекулярних систем коливально-поступальний характер теплового руху частинок в полімерній системі спостерігається при будь-яких концентраціях дисперсної фази, оскільки частинки знаходяться в пружному середовищі - полімерній матриці.

Релаксаційний  $\phi$ -процес характеризується відповідним дискретним часом релаксації, займає положення між часом хімічної релаксації і часом  $\lambda$ -релаксації в дискретному спектрі часів релаксації полімеру.

**Висновки.** Таким чином, встановлено, що для нанокompозитів системи пентапласт - ВНТ, характерним є також поділ процесу переходу з високоеластичного в в'язкотекучий стан на дві складові - низько- і високотемпературну, що пояснюється сильним структуруючим впливом ВНТ на граничні шари пентапласту і проявляється в утворенні поряд зі звичайною для пентапласту більш упорядкованої структури, яка переходить у в'язкотекучий стан при більш високій температурі. Крім того, наповнений пентапласт характеризується наявністю додаткових релаксаційних переходів, що також обумовлюється впливом активного наповнювача.

### Література:

1. Мулин Ю.А., Ярцев И.К. Пентапласт. – Л.: Химия, 1975. – 120 с.
2. Гуревич Ю.Я. Твердые электролиты. – М.: Наука, 1986. – 206 с.

3. *Rokitskaya G., Rokitskiy M., Shut M.* Effect of different nature filler on heat physical properties of polymer composite materials // Abstracts of the Ukrainian – German Symposium on Physics and Chemistry of Nanostructures and on Nanobiotechnology (September 21-25, 2015, Kyiv, Ukraine). – 2015. – P. 205.
4. *Рокицька Г.В., Шут Н.И., Рокицький М.А.* Определение параметров фазовых нестабильностей системы пентапласт – AgI // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2017. – № 2. – С. 95-101.
5. *Шут М.І., Рокицька Г.В., Розанович В.Ю., Рокицький М.О., Шут А.М.* Аналіз температурних залежностей спектрів внутрішнього тертя полімерних систем на основі пентапласту // Матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції “Актуальні проблеми методології та методики навчання фізико-математичних дисциплін” (18 січня 2018 р., м. Київ) – 2017. – С. 82-84.
6. *Shut M.I., Rokitskiy M.A., Shut A.M., Rokitskaya G.V.* Determination of relaxation characteristics complex for penton – AgI matrix – disperse system // Functional Materials. – 2013. – Vol. 20, № 2. – С.221-226.
7. *Шут М.І., Рокицька Г.В., Рокицький М.О., Левандовський В.В., Оранська О.І.* Рентгенографічні дослідження матрично-дисперсної системи на основі пентапласту та йодиду срібла // Науковий часопис НПУ імені М.П. Драгоманова. Серія 1. Фізико-математичні науки, Київ: НПУ імені М.П. Драгоманова. – 2011. – № 12. – С. 6-12.
8. *Бартнев Г.М.* Релаксационный ф-переход в наполненных полимерах и молекулярная подвижность частиц активного наполнителя // Высокомолекулярные соединения. – 1982. – Т. XXIV, № 9. – С. 1836-1841.

***Шут Н.И., Рокицький М.А., Рокицька Г.В., Шут А.Н., Стасюк И.М.***

**Теплофизические свойства полимерных композиционных материалов на основе пентапласта и углеродных нанотрубок**

АНОТАЦІЯ

*Проведены исследования температурных зависимостей удельной теплоемкости и тангенса угла механических потерь  $\text{tg}\delta = f(T)$  систем пентапласт – AgI и пентапласт – УНТ. Выполнено разделение бимодальных зависимостей  $c_p = f(T)$  на составляющие. Проанализированы низкотемпературные релаксационные процессы ( $\beta$ -процессы релаксации), процессы стеклования ( $\alpha$ -процессы релаксации) и медленные высокотемпературные переходы ( $\lambda$ - и  $\phi$ -процессы релаксации), происходящие в полимерной матрице композиционных материалов.*

**Shut M.I., Rokytskyi M.O., Rokytska H.V., Shut A.M., Stasiuk I.M.**

**Thermophysical properties of polymer composite materials based on penton and carbon nanotubes**

SUMMARY

*The temperature dependences of the specific heat and tangent of the mechanical losses angle  $\text{tg}\delta = f(T)$  of the penton - AgI and penton - CNT systems have been studied. The bimodal dependencies  $c_p = f(T)$  have been separated into components. Low-temperature relaxation processes ( $\beta$ -relaxation processes), glass transitions processes ( $\alpha$ -relaxation processes) and slow high-temperature transitions ( $\lambda$ - and  $\varphi$ -relaxation processes) occurring in the polymer matrix of composite materials have been analyzed.*

УДК 621.384.663, 577.3, 614.715

**Щекатолина С. А., Жарюк В. Н.**

Одесская национальная академия пищевых технологий

E-mail: skontush@odessaglobe.com

### **Обмен липидами между липопротеинами низкой и высокой плотности с учетом окисления липопротеинов низкой плотности**

*В работе предложена модифицированная модель переноса липидов между липопротеинами низкой и высокой плотности (ЛПНП и ЛПВП). Модификация касается введения в модель обмена между ЛПНП, модифицируемых под действием потока радикалов в стенке сосуда, и ЛПВП. Изучено влияние потока радикалов, липидного состояния организма и концентрации СЕТР на обмен липидами. Анализ модельных расчетов показывает, что в условиях действия больших потоков радикалов перенос эфиров холестерина (СЕ) и триглицеридов (Тг) между ЛПНП и ЛПВП меняет свой характер: СЕ переносятся к ЛПВП, а Тг – к ЛПНП. Такое изменение характера переноса может повлиять на обратный транспорт холестерина (ОТХ).*

#### **Условные обозначения**

ЛП – липопротеины

ЛПОНП ( $LP_1$ ) – липопротеин очень низкой плотности

ЛПНП ( $LP_2$ ) – липопротеин низкой плотности

ЛПВП<sub>2</sub> ( $LP_3$ ), ЛПВП<sub>3</sub> ( $LP_4$ ) – липопротеины высокой плотности

ЛПНП<sub>ок</sub> ( $LP_5$ ) – окисленный липопротеин низкой плотности

СЕ – эфиры холестерина

Тг – триглицериды

СЕТР – белок-переносчик эфиров холестерина

СЕ<sub>LP<sub>j</sub></sub> – СЕ липопротеина LP<sub>j</sub>, j = 1, 2, 3, 4, 5

Тг<sub>LP<sub>j</sub></sub> – Тг липопротеина LP<sub>j</sub>, j = 1, 2, 3, 4, 5

LP<sub>j</sub> – СЕТР (LP<sub>j</sub>C) – комплекс липопротеина LP<sub>j</sub> с белком СЕТР

СЕ<sub>LP<sub>j</sub>C</sub> – СЕ комплекса LP<sub>j</sub>C, j = 1, 2, 3, 4, 5

Тг<sub>LP<sub>j</sub>C</sub> – Тг комплекса LP<sub>j</sub>C, j = 1, 2, 3, 4, 5

R – радикалы

Pt – поток радикалов

$k_j$  – константы скорости обмена липидами или окислительных реакций, j = 1, ..., 58

$C_j$  – концентрация, j – молекула, липопротеин

**Введение.** Предметом исследования в настоящей статье являются сосудистые изменения, происходящие в теле человека под влиянием различных неблагоприятных факторов и приводящие к одной из самых распространенных причин смертности человека в развитых странах – атеросклероза, заканчивающегося инфарктами и инсультами. Уровень развития медицины за последние десятилетия

тилетия вывел медицину из эмпирических наук в разряд физико-химических наук, когда экспериментальные и теоретические исследования организма человека проводятся физическими и химическими методами с широким использованием математики. Широко привлекаются также технические достижения, особенно в области электроники и нанотехнологий.

Как известно, атеросклероз – это поражение артерий, связанное с образованием и ростом бляшек на стенках артерий, при этом в начале развития процесса поражается поверхностный слой стенок артерий, обращенный к току крови. Этот слой называется субэндотелиальным. Зарождение и развитие атеросклероза связано с попаданием в субэндотелий особых частиц крови – липопротеинов (ЛП), содержащих АроВ протеины на поверхности липидной части ЛП. К ним относятся ЛПОНП, ЛПНП и ЛПВП (липопротеины промежуточной плотности). Эти частицы имеют нанометровые размеры и сравнительно большое липидное содержимое по сравнению с белковой частью.

Начало и развитие атерогенеза рассматривается на основе взаимодействия модифицированных липопротеинов низкой плотности (ЛПНП) с внеклеточной матрицей субэндотелия, которое способствует различными путями модификации и разрушению липидов и началу воспалительного процесса в стенке сосуда. Широкое распространение получила модель «Отклик на задержание» [1, 2, 3, 4], по которой начало развития атеросклероза связано с задержкой модифицированных ароВ липопротеинов в чувствительной области эндотелия с последующей модификацией липопротеинов и развитием биологических откликов на эти изменения[5,6].

Модификация ЛПНП происходит различными путями. Из них достаточно хорошо изучены три пути: окисление ЛПНП, их агрегация и липолиз. В результате модификации липопротеины увеличивают свои размеры или свое взаимодействие с молекулами внеклеточной матрицы, в первую очередь, с протеогликанами [5,7-10].

В настоящей работе рассматривается один из трех вышеупомянутых путей модификации АроВ ЛП – окислительный, он связан с проникновением в организм разнообразных загрязнителей, среди которых наиболее опасными являются радикалы (в первую очередь, радикалы кислорода) или молекулы, побуждающие образование радикалов в организме. Показано [11], что окисленные ЛПНП присутствуют в атеросклеротических бляшках, однако степень окисления, а значит, и их характеристики меняются по мере развития бляшек. Липопротеины зарождаются в печени и кишечнике, секретируются в кровь и переносятся по всему организму током крови. Между липопротеинами низкой и высокой плотности – ЛПНП и ЛПВП – основными липопротеинами, присутствующими в циркуляции, может происходить обмен липидами как неокисленными, так и окисленными. На поверхности ЛПНП содержатся фосфолипиды и свободный холестерин, а в центральной части частиц, называемой кором, – более гидрофобные молекулы эфиров холестерина и триглицеридов.

Окисление ЛПНП в данной работе рассматривается как одно из важнейших событий в развитии атеросклероза. Хорошо известно, что уровни холестерина ЛП, находящихся в плазме крови (например, плазменных ЛПНП), можно

рассматривать как маркер атеросклеротической болезни, так как уровень холестерина в этой частице прямо коррелирует со степенью развития атеросклероза. В отличие от ЛПНП, уровни холестерина в ЛПВП обратно коррелируют с уровнем развития сердечнососудистых заболеваний [12]. В литературе установилось мнение о том, что антиатерогенная функция ЛПВП связана со способностью ЛПВП отбрасывать холестерин у ЛПНП и переносить его в печень для последующей экскрекции с помощью желчи. Этот процесс получил название обратного транспорта холестерина (ОТХ).

Перенос эфиров холестерина между ароВ- и ароА- содержащими липопротеинами осуществляется с помощью белка-переносчика эфиров холестерина (СЕТР). В нем участвуют также гидропероксиды фосфолипидов (PLOOH).

Было показано, что липиды передаются как между липопротеинами низкой и высокой плотности, так и от липопротеинов к печени, при этом быстрее передаются окисленные липиды. Передача липидов к печени *in vitro* осуществляется путем селективного захвата клетками печеночной паренхимы [12]. Окисленные пероксиды эфиров холестерина СЕ (СЕ-ОН) тоже быстро убираются из ЛПВП с помощью печеночного клиренса *in vivo*, и это связано с секрецией желчи окисленным холестерином, полученным из липидов.

**1. Модель.** Настоящая работа - это попытка решить некоторые медицинские задачи возникновения и развития атеросклероза на базе теплофизических и экологических областей науки. В статье решается небольшая, но важная в развитии атеросклероза часть общей задачи – обмен липидами между различными липопротеинами. Новой частью этой задачи является включение в обмен окисленных липидов.

С физико-химической точки зрения в модель включены два процесса: окисление липопротеинов и обмен окисленными и неокисленными липидами. В окислении участвуют наиболее распространенные ЛПНП, а в обмене – липопротеины низкой плотности (ЛПОНП и ЛПНП) и липопротеины высокой плотности (ЛПВП<sub>2</sub> и ЛПВП<sub>3</sub>). Окисление производится потоком радикалов R, а обмен реализуется по челночной модели, разработанной в работе [14].

По челночной модели, СЕТР связывается с одним из липопротеинов ЛПНП, образуя комплекс ЛПНП-СЕТР. В этом комплексе происходит двунаправленный перенос эфиров холестерина (СЕ) и триглицеридов (Тg) между ЛП и СЕТР. Затем комплекс распадается, а высвободившиеся липопротеины и СЕТР имеют измененный липидный состав. Этот процесс распада можно рассматривать как диссоциацию. Считаем при этом, что и связывание, и диссоциация происходят без изменения активности участвующих в этих процессах частиц, а обмен липидами является эквимольным. Затем СЕТР сталкивается с другим ЛП - ЛПВП, образует с ним новый комплекс, внутри которого снова происходит двунаправленный обмен липидами и последующий распад комплекса на СЕТР и ЛП. Таким образом, СЕТР служит мостиком, осуществляющим обмен между двумя различными липопротеинами [14, 15, 16].

Наиболее важным в развитии атеросклероза является обмен липидами между ЛПНП и ЛПВП. Это объясняется тем, что ЛПНП поставляют в стенки со-

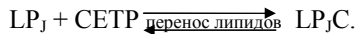




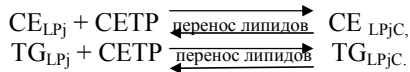
**Рис. 1.** Модель обмена липидами между липопротеинами низкой и высокой плотности с участием CETP [12]

суда избыточные липиды, которые могут модифицироваться в бляшке или при-бляшечной области, а ЛПВП уносят избыток холестерина из периферической ткани в печень и, следовательно, способны уменьшать атеросклеротические бляшки в процессе обратного транспорта холестерина (ОТХ).

**2. Математическая формулировка модели обмена липидами.** Образование комплексов липопротеинов с CETP и их распад могут быть записаны в виде химической реакции:



Аналогично может быть записано взаимодействие CE и Tg различных липопротеинов с молекулой CETP:



Потоки липидов можно записать через относительные концентрации CE и TG в комплексе и CE и TG в молекуле CETP для случая гетерообмена (CE на TG и наоборот) между apoB и apoA липопротеинами [14]:

$$\begin{aligned} J_{1j} &= (TG_{LP_jC} / (CE_{LP_jC} + TG_{LP_jC})) \cdot (CE_{CETP} / (CE_{CETP} + TG_{CETP})), \\ J_{2j} &= (CE_{LP_jC} / (CE_{LP_jC} + TG_{LP_jC})) \cdot (TG_{CETP} / (CE_{CETP} + TG_{CETP})). \end{aligned}$$

Скорости изменения со временем CE и TG комплексов определяются по уравнениям (2, 3) плюс перенос потоками:

$$\begin{aligned} A \cdot [LP_jC] \cdot (J_{2j} - J_{1j}) &\text{ для TG} \\ A \cdot [LP_jC] \cdot (J_{1j} - J_{2j}) &\text{ для CE.} \end{aligned}$$

и

Здесь  $A = 10^{-6} N_0 \cdot k_{tr} \cdot k_j \cdot (1 - \alpha)$  [14],  $N_0$  – число Авогадро,  $k_{tr} = 0,167 \cdot 10^{-14}$  1/с,  $k_j = 0,73$ ,  $\alpha = 0,62$ ;  $A = 279$ .

Рассмотрим ЛПНП периферической ткани, в которую непрерывно поступает поток радикалов с постоянной скоростью  $r_f$ . Хорошо известно, что на один ЛПНП в среднем приходится 6 молекул – антиоксидантов  $\alpha$ -ТосН, принимающих при попадании радикала в частицу удар на себя и нейтрализующих радикал за счет собственного разрушения.

Считаем, что вначале все ЛПНП содержат 6 молекул витамина E и при каждом столкновении с радикалом поочередно утрачивают эти молекулы [11]. Окисление ЛПНП происходит лишь при столкновении с радикалом частицы, утратившей все молекулы – защитники, т.е. с концентрацией токоферола ТосН, равной нулю.

**Таблица 1.** Начальные концентрации исходных веществ [11, 14]

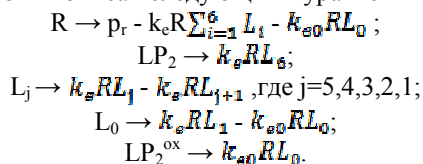
Частицы, молекулы, комплексы	C <sub>0</sub> , мМ	Частицы, молекулы, комплексы	C <sub>0</sub> , мМ	Частицы, молекулы, комплексы	C <sub>0</sub> , мМ
LP <sub>1</sub>	1,622	LP <sub>3</sub> C	0	L4	0
LP <sub>2</sub>	5,47	LP <sub>4</sub> C	0	L3	0
LP <sub>3</sub>	1,625	СЕТР	0,52·10 <sup>-2</sup>	L2	0
LP <sub>4</sub>	2,53	СЕСЕТР	1,04·10 <sup>-3</sup>	L1	0
СЕ <sub>LP1</sub>	0,265	TG <sub>СЕТР</sub>	1,58·10 <sup>-4</sup>	L0	0
СЕ <sub>LP2</sub>	2,184	СЕ <sub>LP1</sub> C	2,301·10 <sup>-4</sup>	LP <sub>5</sub> <sup>ox</sup>	0
СЕ <sub>LP3</sub>	0,325	СЕ <sub>LP2</sub> C	1,897·10 <sup>-3</sup>	R	0,5·10 <sup>-8</sup>
СЕ <sub>LP4</sub>	0,406	СЕ <sub>LP3</sub> C	2,822·10 <sup>-4</sup>	СЕ <sub>LP5</sub> <sup>ox</sup>	0
TG <sub>LP1</sub>	0,806	СЕ <sub>LP4</sub> C	3,526·10 <sup>-4</sup>	TG <sub>LP5</sub> <sup>ox</sup>	0
TG <sub>LP2</sub>	0,442	TG <sub>LP1</sub> C	6,999·10 <sup>-4</sup>	LP <sub>5</sub> C	0
TG <sub>LP3</sub>	4,94·10 <sup>-2</sup>	TG <sub>LP2</sub> C	3,837·10 <sup>-4</sup>	СЕ <sub>LP5</sub> C	0
TG <sub>LP4</sub>	5,98·10 <sup>-3</sup>	TG <sub>LP3</sub> C	4,29·10 <sup>-5</sup>	TG <sub>LP5</sub> C	0
LP <sub>1</sub> C	0	TG <sub>LP4</sub> C	5,193·10 <sup>-5</sup>		

Модель содержит 3 параметра:  $P_r$  – скорость производства радикалов;  $k_e$  – скорость реакции молекул витамина Е внутри частицы ЛПНП при взаимодействии со свободным радикалом);  $k_{e0}$  по экспериментальным результатам – константа скорости для водорода, удаленного из бесаллиловой метиленовой группы жирной кислоты.

Объединение моделей окисления и обмена приводит к более реалистичной модели, охватывающей образование модифицированных липидов в стенке субэндотелия сосуда.

Обозначим  $L_0(t)$ ,  $L_1(t)$ ,  $L_2(t)$ ,  $L_3(t)$ ,  $L_4(t)$ ,  $L_5(t)$ ,  $L_6(t) = LP_2$  и  $L_{ox}(t) = LP_5$ , где  $L_i(t)$  - концентрации в мМ частиц ЛПНП, содержащих от 0 до 6 неокисленных молекул альфа-токоферола ( $\alpha$ -ТосН).

Тогда процесс окисления ЛПНП радикалами кислорода R, поступающими в виде потока  $pr$ , может быть описан следующими уравнениями [11]:



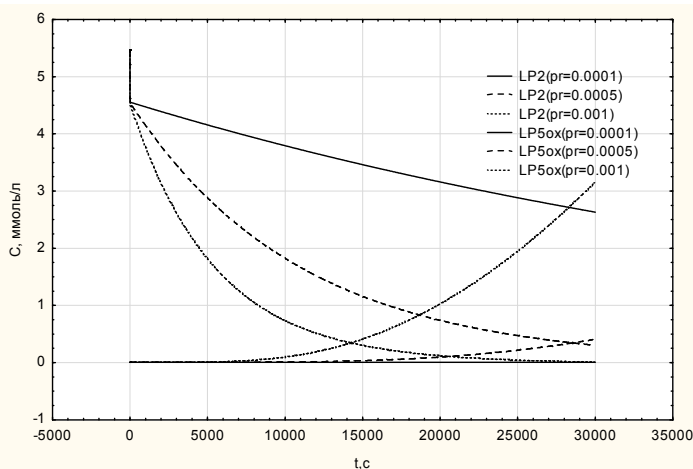
Постоянная  $k_e$  взята из экспериментов [14] и равна 3 мМ<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup> (для пероксид-радикалов);  $k_{e0}=6 \cdot 10^{-2}$  мМ<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup> для удаления молекулы ТосН из ЛПНП. Так как ЛПНП состоят из этих групп и этот процесс соответствует конечной стадии перекисного окисления липидов, кажется разумным использовать эту оценку для констант скорости  $k_{e0}$ . В расчетах были приняты следующие значения величин: скорости поступления R в среду  $pr=0,0001$  мМс<sup>-1</sup>; 0,0005 мМс<sup>-1</sup>; 0,001 мМс<sup>-1</sup> и начальная концентрация радикалов  $R(0) = 1$  мМ/с. В процессе расчетов выявлено слабое влияние  $R(0)$  в условиях задачи.

Равенство констант связывания (нечетные константы) и диссоциации (чет-

**Таблица 2.** Значения констант скоростей процессов [11, 12, 14]

$k_i$	Значение $k_i$	$k_i$	Значение $k_i$	$k_i$	Значение $k_i$	$k_i$	Значение $k_i$	$k_i$	Значение $k_i$
$k_1$	167	$k_{13}$	167	$k_{25}$	167	$k_{37}$	279	$k_{49}$	$6 \cdot 10^{-2}$
$k_{2*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{14*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{26*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{38}$	279	$k_{50}$	$6 \cdot 10^{-2}$
$k_3$	167	$k_{15}$	167	$k_{27}$	167	$k_{39}$	167	$k_{51}$	$3 \cdot 10^3$
$k_{4*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{16*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{28*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{40*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{52}$	1670
$k_5$	167	$k_{17}$	167	$k_{29}$	167	$k_{41}$	167	$k_{53*}$	$4 \cdot 10^{-1}$
$k_{6*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{18*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{30*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{42*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{54}$	1670
$k_7$	167	$k_{19}$	167	$k_{31}$	167	$k_{43}$	167	$k_{55*}$	$4 \cdot 10^{-1}$
$k_{8*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{20*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{32*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{44*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{56}$	1670
$k_9$	167	$k_{21}$	167	$k_{33}$	167	$k_{45}$	$6 \cdot 10^{-2}$	$k_{57*}$	$4 \cdot 10^{-1}$
$k_{10*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{22*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{34*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{46}$	$6 \cdot 10^{-2}$	$k_{58}$	455
$k_{11}$	167	$k_{23}$	167	$k_{35}$	279	$k_{47}$	$6 \cdot 10^{-2}$		
$k_{12*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{24*}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$k_{36}$	279	$k_{48}$	$6 \cdot 10^{-2}$		

$k_i^*$  относится к реакциям первого порядка и имеют размерность  $c^{-1}$ ; все остальные константы скорости относятся к реакциям второго порядка и имеют размерность  $c^{-1} \text{ мМ}^{-1}$ .



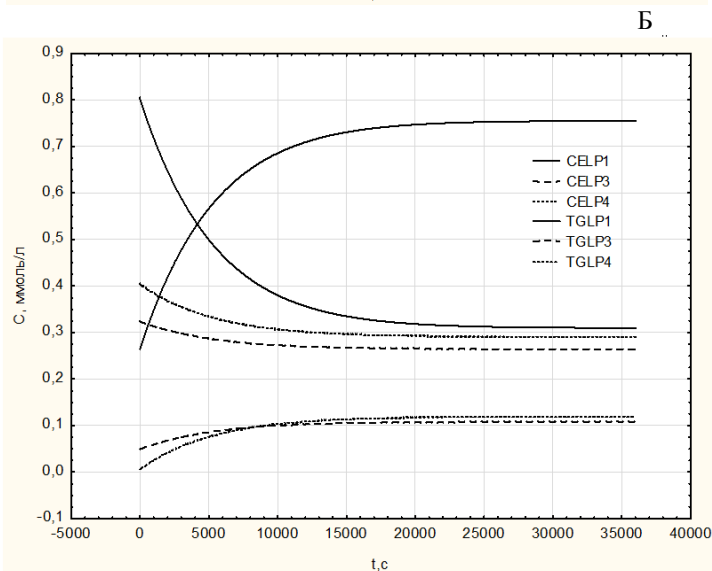
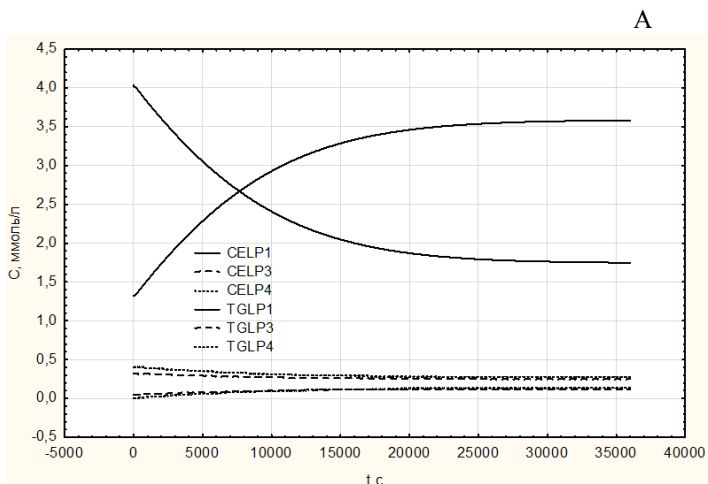
**Рис. 2.** Влияние потоков радикалов ( $pr = 0.0001$ ,  $pr = 0.0005$ ,  $pr = 0.001$   $\text{мМ c}^{-1}$ ) на разрушение  $LP_2$  и появление  $LP_5$

ные константы) для разных липопротеинов следует из кристаллической структуры СЕТР [17] и из того, что все липопротеины имеют одинаковое средство к связыванию с СЕТР [18].

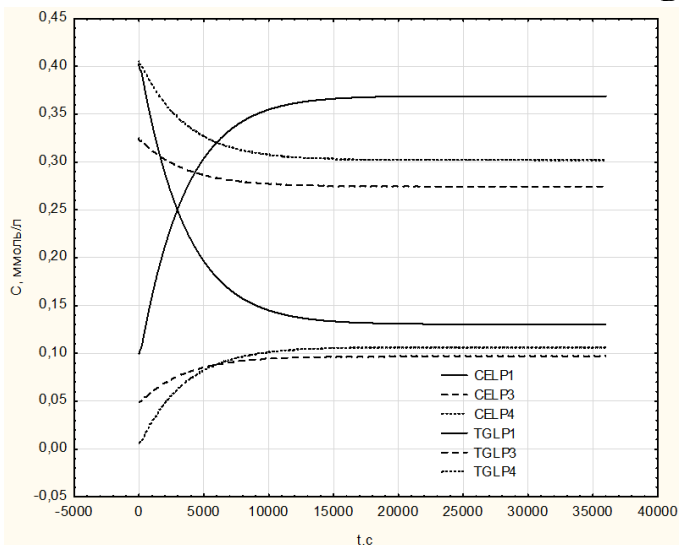
**Результаты расчета.** Были проведены расчеты по изучению обмена липидами между липопротеинами низкой и высокой плотности с учетом окислительной модификации ЛПНП. Многочисленные эксперименты *in vitro* обнаружили обширную перекисидацию, когда ЛПНП модифицировались эндотелиальными или гладкими мышечными клетками, а также моноцитами и макрофагами [15]. Это послужило основанием гипотезы о том, что окисление липидов играет

ключевую роль в возникновении атерогенеза под действием окисленных ЛПНП, что подтверждалось обнаружением в бляшках малонового диальдегида и других конечных продуктов пероксидации холестерина и триглицеридов.

Целью расчетов было выявления влияния окисления на обмен СЕ и Тg в разных липидных состояниях организма и при различных концентрациях СЕТg. В работе принято, что модификация происходит под действием трех разных потоков радикалов  $rg=0,0001; 0,0005$  и  $0,001$  мМ/с. Такие потоки отвечают сред-



**Рис.3.** Влияние липидного состояния организма на обмен липидами между ЛПОНП и ЛПВП<sub>2</sub>, ЛПВП<sub>3</sub>: А – ожирение, Б – нормальный организм, В – истощение.



**Рис. 3.** Влияние липидного состояния организма на обмен липидами между ЛПОНП и ЛПВП<sub>2</sub>, ЛПВП<sub>3</sub>: А - ожирение, Б - нормальный организм, В - истощение

ним використовуваним в експерименті *in vitro* умовам окислення. Окислення ліпідів ЛПНП приводить до появи окислених модифікованих ліпопротеїнів, так як утворюючися гідропероксиди ліпідів можуть руйнувати і модифікувати білок apoB, внаслідок чого утворюються високоактивні стани ЛПНП. Точні події, що призводять до утворення окисленої модифікації ЛПНП *in vivo*, активно вивчаються в даний час; при цьому перенос існуючих в клітках (печінки або периферических тканин) окислених ліпідів від кліток або ліпопротеїнів важливий для процесів ОТХ і росту бляшок при атерогенезі. Нижче представлені кінетическі зміни концентрації ЛПНП і модифікованої ЛПНП<sup>ox</sup> (LP<sub>3</sub>). На рис.2 представлені ЛПНП і ЛПНП<sup>ox</sup> в результаті окислення за 30 000 сек. Видно, що кількість модифікованих ЛПНП за цей час в разі мінімального потоку радикалів становить приблизно 0,006 ммоль і збільшується ~ в 9 раз при збільшенні потоку радикалів в 5 раз і в ~270 раз при збільшенні потоку радикалів в 10 раз.

Було досліджено вплив початкового ліпідного стану організму (ожиріння, нормальний організм, виснаження) на окислення і обмін ліпідами для неокисленого і модифікованого внаслідок окислення ЛПНП.

Обмін ліпідами між ліпопротеїнами низької і високої щільності представлений на рис.3.

Видно, що процес обміну ліпідами між ліпопротеїнами має дві фази – швидку (1) і повільну (2). В табл.3 наведені основні характеристики процесу обміну (концентрації ліпідів в початковий і кінцевий мо-

**Таблица 3.** Обмен липидами СЕ и Tg между LP<sub>1</sub> и LP<sub>3</sub>, LP<sub>4</sub> при ожирении, в нормальном организме и в истощенном организме при  $r_T = 0,0001$  за 10ч

CE <sub>LP1</sub>							
	C <sub>0</sub> , мМ	C <sub>гр</sub> , мМ	C <sub>к</sub> , мМ	t <sub>гр</sub> , мМ/ч	V <sub>гр</sub> , мМ/ч	V <sub>1</sub> , мМ/ч	V <sub>2</sub> , мМ/ч
Ожирение	1,325	1,77	3,59	3,08	0,29	0,144	0,074
Нормальный организм	0,265	0,65	0,748	2,3	0,073	0,168	0,013
Истощение	0,1	0,335	0,37	2,083	0,037	0,113	0,0044
Tg <sub>LP1</sub>							
Ожирение	4,03	2,3	1,73	3,08	-0,287	-0,56	-0,082
Нормальный организм	0,806	0,388	0,312	2,61	-0,095	-0,203	-0,01
Истощение	0,405	0,172	0,13	1,94	-0,039	-0,12	-0,0052

**Таблица 4.** Изменение СЕ и Tg LP<sub>2</sub> в трех состояниях организма (ожирение, нормальный организм, истощение) при различных концентрациях СЕТР

СЕТР, мМ	0,052	0,0052	0,00052	0,052	0,0052	0,00052
CE <sub>LP2</sub>						
	CE <sub>0</sub> , мМ	CE <sub>к</sub> , мМ			V <sub>ср</sub> CE, мМ/ч	
Ожирение	4,368	3,94	4,21	4,36	-0,051	-0,019
Нормальный организм	2,184	1,84	2,04	2,17	-0,041	-0,017
Истощение	1,092	0,863	0,965	1,075	-0,027	-0,015
Tg <sub>LP2</sub>						
	Tg <sub>0</sub> , мМ	Tg <sub>к</sub> , мМ			V <sub>ср</sub> Tg, мМ/ч	
Ожирение	0,884	1,27	1,03	0,9	0,046	0,017
Нормальный организм	0,442	0,77	0,59	0,48	0,039	0,018
Истощение	0,221	0,445	0,35	0,237	0,027	0,015

мент времени C<sub>0</sub> и C<sub>к</sub>, соответственно, и средние скорости обмена в быстрой и медленной фазах V<sub>1</sub> и V<sub>2</sub>, а также время t<sub>гр</sub> и скорость обмена V<sub>гр</sub> на границе двух фаз) при различных липидных состояниях организма (нормальное состояние, ожирение и истощение).

Расчеты показывают, что липидное состояние не влияет на направление передачи липидов: Tg переносится от ЛПОНП к ЛПВП, а СЕ переносится от ЛПВП к ЛПОНП в любом липидном состоянии, что подтверждается работами [19, 20], а для ЛПНП наоборот: триглицериды переносятся от ЛПВП к ЛПНП, а СЕ – от ЛПНП к ЛПВП. Скорости передачи зависят от липидного состояния: чем выше начальная концентрация СЕ и Tg, тем больше скорость передачи липидов. Сравнение переданных и полученных другими ЛП липидов показывает, что гетерообмен не описывает полностью передачу липидов. Повидимому, определенную роль оказывают процессы передачи липидов по другим механизмам.

**Таблица 5.** Действие СЕТР на липидный обмен между LP<sub>1</sub> и LP<sub>3</sub>, LP<sub>4</sub> при различных концентрациях СЕТР

СЕТР, мМ		0,00052	0,0052	0,052	0,00052	0,0052	0,052
СЕ <sub>LP1</sub>							
	Начальная концентрация, мМ	Конечная концентрация, мМ			Средняя скорость обмена, мМ/ч		
Ожирение	1,325	1,413	2,066	3,55	0,0088	0,0741	0,2225
Нормальный организм	0,265	0,302	0,529	0,754	0,0037	0,0264	0,0489
Истощение	0,1	0,13	0,286	0,369	0,003	0,0186	0,0269
Тg <sub>LP3</sub>							
Ожирение	0,0494	0,052	0,073	0,12	0,0026	0,00236	0,00706
Нормальный организм	0,0494	0,053	0,08	0,108	0,00036	0,003	0,00586
Истощение	0,0494	0,055	0,082	0,097	0,00056	0,00326	0,00476
Тg <sub>LP4</sub>							
Ожирение	0,00598	0,011	0,048	0,132	0,0005	0,0042	0,00826
Нормальный организм	0,00598	0,0144	0,066	0,119	0,00084	0,006	0,0113
Истощение	0,00598	0,0172	0,076	0,107	0,00112	0,007	0,01
СЕТР, мМ		0,00052	0,0052	0,052	0,00052	0,0052	0,052
Тg <sub>LP1</sub>							
	Начальная концентрация, мМ	Конечная концентрация, мМ			Средняя скорость обмена, мМ/ч		
Ожирение	4,03	3,95	3,288	1,788	-0,008	-0,0742	-0,2242
Нормальный организм	0,806	0,77	0,54	0,31	-0,0036	-0,0266	-0,049
Истощение	0,403	0,374	0,217	0,13	-0,0029	-0,0186	-0,0273
СЕ <sub>LP3</sub>							
Ожирение	0,325	0,323	0,301	0,253	-0,0002	-0,0024	-0,0072
Нормальный организм	0,325	0,321	0,29	0,264	-0,0004	-0,0035	-0,0061
Истощение	0,325	0,319	0,292	0,274	-0,0006	-0,0033	-0,0051
СЕ <sub>LP4</sub>							
Ожирение	0,406	0,402	0,365	0,279	-0,0004	-0,0041	-0,0127
Нормальный организм	0,406	0,398	0,345	0,29	-0,0008	-0,0061	-0,0116
Истощение	0,406	0,396	0,336	0,302	-0,001	-0,007	-0,0104

В работе было изучено действие активности СЕТР на обмен липидами между липопротеинами низкой и высокой плотности (рис.4). Влияние СЕТР показало, что качественно поведение конечной концентрации СЕТР за ~10 часов и скорости изменения его концентрации при обмене липидами не зависит от ли-

пидного состояния организма и происходит уменьшение эфиров холестерина (СЕ) ЛПНП и увеличение триглицеридов (Tg) ЛПНП при обмене липидами. Количественно (см. таб.4) скорости обмена растут с ростом концентрации СЕТР как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения СЕ и Tg, и этот рост (падение) увеличивается ~ в 25 раз при изменении концентрации СЕТР в 100 раз по Tg и ~ в 50 раз по СЕ при тех же условиях.

Молекула СЕТР играет важную роль в обратном транспорте холестерина (ОТХ), обеспечивая перенос СЕ в обмен на Tg от ЛПВП к ЛПОНП и ЛПНП, которые образуются в печени при захвате ЛПНП с помощью молекул LDL-R (рецепторы ЛПНП). Это часть бинаправленного обмена, который включает также перенос триглицеридов от ЛПОНП и ЛПНП к ЛПВП, как было показано на рис.1.

Связь между СЕТР и атеросклерозом коронарных сосудов полностью не выяснена. Работы по влиянию концентрации СЕТР на результирующий обмен носят противоречивый характер. В настоящей работе проведен анализ действия СЕТР на обмен липидами по челночной модели. На рис. 4 приведены результаты действия СЕТР на обмен липидами между ЛП низкой и высокой плотности различных липидных состояниях. На каждом из рис. А, Б и В действие СЕТР происходит при нормальной концентрации СЕТР (Б), а также при десятикратно повышенной (А) и десятикратно пониженной концентрации СЕТР (В).

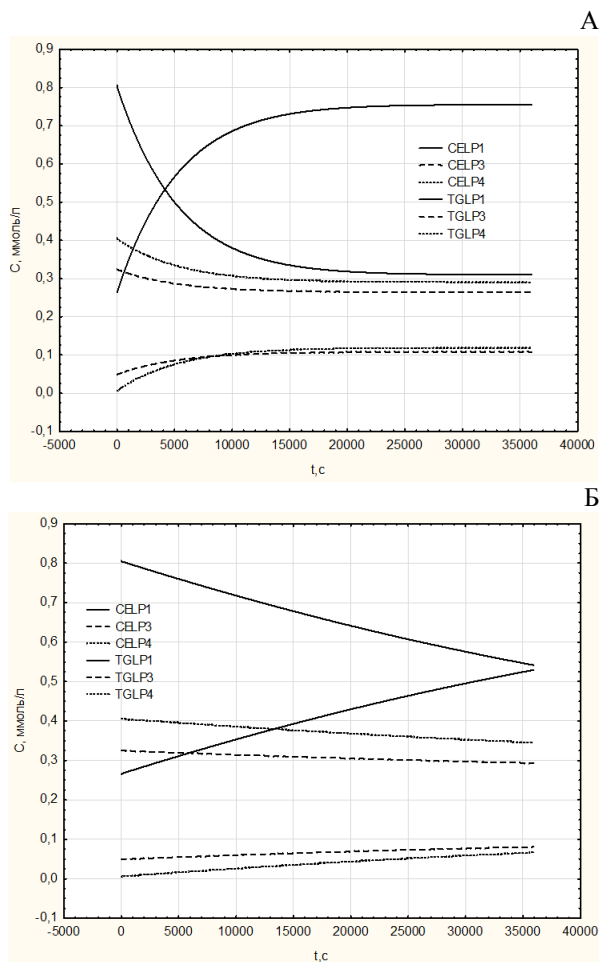
Выше были описаны особенности обмена липидами между ЛПОНП и ЛПВП. Рассмотрим теперь эти же особенности обмена при наличии окисления, то есть в случае обмена между ЛПНП и ЛПВП – при одновременном воздействии потока радикалов и концентрации СЕТР на процесс обмена липидами. Результаты расчетов приведены на рис.5 и в таб.6.

Как видно из анализа кинетических данных, передача липидов определялась окислением больше, чем обменом, в результате чего СЕ у  $LP_2$  уменьшалось, а  $Tg_{LP_3}$ ,  $Tg_{LP_4}$  увеличивалось и тем быстрее, чем больше  $rg$  (см. табл.6).

Проведенный анализ может быть полезен при разработке модели обратного транспорта холестерина и в целом – при изучении метаболизма липидов в организме.

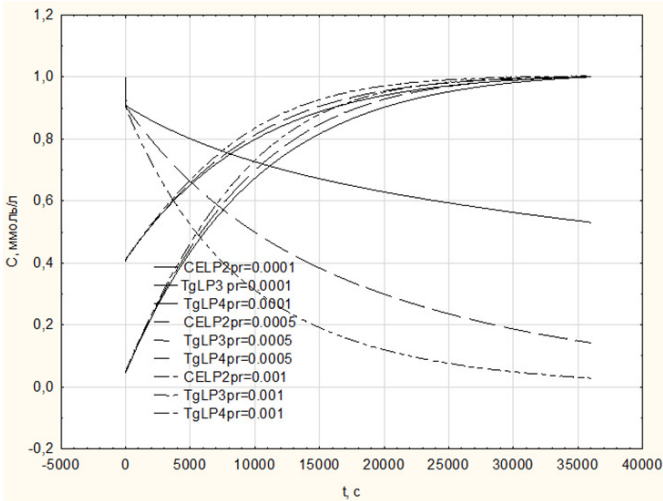
**Обсуждение результатов.** Чтобы оценить вклад полученных в работе результатов модельных расчетов, необходимо помнить о роли ЛПНП-СЕ и ЛПВП-СЕ (холестерин ЛПНП и ЛПВП, соответственно) в очищении кровотока от холестерина. Как известно, ЛПВП переносят избыток холестерина ЛПВП-СЕ от периферических тканей в печень для последующего его удаления печенью из организма. В то же время удаление ЛПНП-С из кровотока регулируется молекулами LDL-R, находящимися на поверхности клеток печени. Они дезактивируются при увеличении печеночного пула холестерина, что обеспечивает рост плазменного ЛПНП-СЕ. Однако при постоянном притоке пищевого холестерина некоторые насыщенные жирные кислоты снижают активность, а ряд ненасыщенных жирных кислот повышает активность LDL-R, снижая печеночный пул холестерина. Так, по-видимому, регулируется пищевой поток холестерина ЛПНП-С в печени и частично в плазме.



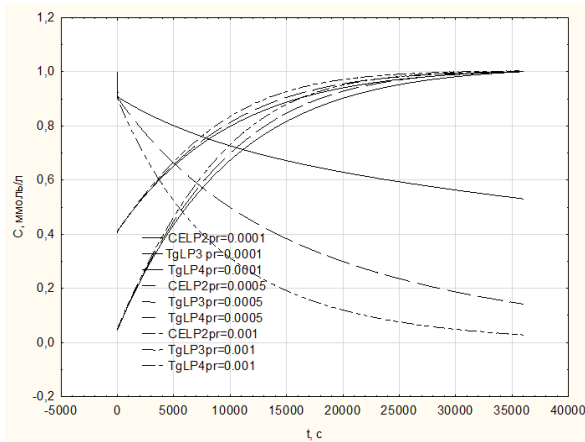


**Рис. 4.** Влияние концентрации СЕТР на передачу СЕ и Тg между ЛПОНП, ЛПВП<sub>2</sub>, ЛПВП<sub>3</sub> в нормальном организме. А - СЕТР= 0.52e-1, Б - СЕТР = 0.52e-2, В - СЕТР = 0.52e-3

В



**Рис. 4.** Влияние концентрации СЕТР на передачу СЕ и Тg между ЛПОНП, ЛПВП<sub>2</sub>, ЛПВП<sub>3</sub> в нормальном организме. А - СЕТР= 0.52e-1, Б - СЕТР = 0.52e-2, В - СЕТР = 0.52e-3



**Рис. 5.** Влияние окисления и обмена на передачу СЕ и Тg между ЛПНП, ЛПВП<sub>2</sub> и ЛПВП<sub>3</sub>. Расчет проводился при СЕТР=0,052 мМ при ожирении. Окисление проводилось при разных потоках радикалов. Концентрации липидов даны для пула на 1 л плазмы в приведенном виде: путем деления на максимальную концентрацию ( $CE_{\text{poolLP2}}^{\text{max}}=119,46$ ;  $Tg_{\text{poolLP3}}^{\text{max}}=0,195$ ;  $Tg_{\text{poolLP4}}^{\text{max}}=0,332$ )

**Таблица 6.** Основные характеристики обмена липидами LP<sub>2</sub> и LP<sub>3</sub>, LP<sub>4</sub> при окислении LP<sub>2</sub>

рг, мМ/с							
CE <sub>LP2</sub>							
	Начальная концентрация, мМ	Граничная концентрация, мМ	Конечная концентрация, мМ	Граничное время, сек	Средняя скорость в I фазе, мМ/ч	Средняя скорость во II фазе, мМ/ч	Средняя скорость за полное время окисления, мМ/ч
0,0001	1	0,783	0,52	6400	-0,0122	-0,0032	-0,0048
0,0005	1	0,44	0,14	11500	-0,175	-0,044	-0,0086
0,001	1	0,27	0,04	11500	-0,228	-0,029	-0,00925
Tg <sub>LP3</sub>							
0,0001	0,045	0,77	1	12000	0,218	0,0234	0,0882
0,0005	0,045	0,82	1	10500	0,266	0,0466	0,110
0,001	0,045	0,83	1	9500	0,303	0,0538	0,119
Tg <sub>LP4</sub>							
0,0001	0,407	0,65	1	11500	0,0757	0,0441	0,0542
0,0005	0,407	0,72	1	12000	0,0939	0,042	0,0593
0,001	0,407	0,8	1	12500	0,113	0,0326	0,0605

Что касается роли ЛПВП в ОТХ, то здесь на первый план выступают процессы обмена липидами между ЛПОНП и ЛПВП в периферических тканях с последующим переносом липидов в печень. Обмен липидами в коре липопротеинов, как известно, регулируется концентрацией СЕТР, при этом с ростом концентрации СЕТР, как показали расчеты, растет количество липидов, участвующих в обмене. Однако, в случае, когда ЛПНП проникают в эпителий и попадают в окислительные условия, под действием потока радикалов ЛПНП модифицируются и количество неокисленных липидов уменьшается. Это уменьшение за счет окисления при небольших потоках радикалов невелико и им можно пренебречь. Оно может превышать перенос неокисленных липидов только при очень больших потоках радикалов. Такой эффект при определенных условиях может существенно изменить ОТХ. И это может сказаться как на методах подбора лекарств, так и на методах лечения больных сердечнососудистыми заболеваниями для людей, находящихся в неблагоприятных экологических условиях (сильно загрязненные промышленные города).

#### Литература:

1. *Tabas I., Williams K. J., Boren J.* Subendothelial lipoprotein retention as the initiating process in atherosclerosis // *Circulation*. – 2007. - Vol. 116. – P. 1832-1844.
2. *Williams K. J., Feig J. E., Fisher E. A.* Rapid regression of atherosclerosis: insights from the clinical and experimental literature // *Cardiovascular medicine*. – 2008. – Vol.5. - №2. – P. 91-102.

3. *Skålén K, Gustafsson M, Rydberg E. K., Hulten L. M., Wiklund O, Innerarity T. L., Borén J.* Subendothelial retention of atherogenic lipoproteins in early atherosclerosis // *Nature*. – 2002. – Vol. 417. – P. 750–754.
4. *Vikramadithyan R. K., Kako Y, Chen G, Hu Y, Rikawa-Hirasawa E, Yamada Y, Goldberg I. J.* Atherosclerosis in perlecan heterozygous mice // *J Lipid Res*. – 2004. – Vol. 45. – P. 1806–1812.
5. *Khalil M. F., Wagner W. D., Goldberg I. J.* Molecular interactions leading to lipoprotein retention and the initiation of atherosclerosis // *Arterioscler Thromb Vasc Biol*. – 2004. – Vol. 24. – P. 2211–2218.
6. *Williams K. J., Fless G. M., Petrie K. A., Snyder M. L., Brocia R. W., Swenson T. L.* Mechanisms by which lipoprotein lipase alters cellular metabolism of lipoprotein, low density lipoprotein, and nascent lipoproteins: roles for low density lipoprotein receptors and heparan sulfate proteoglycans // *J Biol Chem*. – 1992. – Vol. 267. – P.13284 – 13292.
7. *Williams K. J.* Arterial wall chondroitin sulfate proteoglycans: diverse molecules with distinct roles in lipoprotein retention and atherogenesis // *Curr Opin Lipidol*. – 2001. – Vol. 12. – P. 477–487.
8. *Chait A, Wight T. N.* Interaction of native and modified low-density lipoproteins with extracellular matrix // *Curr Opin Lipidol*. – 2000. – Vol. 11. - P. 457–463.
9. *Talusan P, Bedri S, Yang S, Kattapuram T, Silva N, Roughley P. J., Stone J. R.* Analysis of intimal proteoglycans in atherosclerosis-prone and atherosclerosis-resistant human arteries by mass spectrometry // *Mol Cell Proteomics*. – 2005. – Vol. 4. – P. 1350 – 1357.
10. *Little P. J., Tannock L, Olin K. L., Chait A, Wight T. N.* Proteoglycans synthesized by arterial smooth muscle cells in the presence of transforming growth factor-beta1 exhibit increased binding to LDLs // *Arterioscler Thromb Vasc Biol*. – 2002. – Vol. 22. – P. 55–60.
11. *Cobbold C. A., Sherratt J. A., Maxwell S. R.* Lipoprotein Oxidation and Significance for Atherosclerosis: a Mathematical Approach // *Free Radic. Biol. Med*. – 2002. - Vol. 23. - P. 87-117.
12. *Kontush A., Chapman M. J.* High-density lipoproteins // *Wiles*. - 2012. – 605 pp.
13. *Morton R. E.* Binding of plasma-derived lipid transfer protein to lipoprotein substrates. The role of binding in the lipid transfer process // *J. Biol. Chem*. - 1985. – Vol. 260. – P. 12593-12599.
14. *Potter L. K., Specher D. L., Walker M. C., Tobin F. L.* Mechanism of inhibition defines CETP activity: a mathematical model for CETP in vitro // *J. Lipid Research*. - 2009. - Vol.50. – P. 2222-2234.
15. *Barter, P. J., and M. E. Jones.* Kinetic studies of the transfer of esterified cholesterol between human plasma low and high density lipoproteins // *J. Lipid Res*. – 1980. - Vol.21. – P.238 – 249.
16. *Vogen C. R.* Computational methods for inverse problems // *SIAM*. Philadelphia. - 2002.
17. *Pawzenbock U., Stoker R.* Formation of methionine sulfoxide-containing specific forms of oxidized high-density lipoproteins // *Biochim. Biophys. Acta*. – 2005. - Vol. 1703. - P. 171-181.
18. *Qiu X., Mistry A., Ammirati M. J., Chrnyk B. A., Clark R.W., Cong Y., Culp J. S., Danley D. E., Freeman T. B., Geoghegan K. F., et.al.* Crystal structure of cholesterol ester transfer protein reveals a long tunnel and four bound lipid mole-

- cules//Nat.Struct.Mol.Biol. - 2007. – Vol. 14. – P. 106-113.
19. Wang X., Driscoll D. M., and Morton R. E. Molecular cloning and expression of lipid transfer inhibitor protein reveals its identity with apolipoprotein F//J.Biol.Chem.-1999. - Vol. 274. - P.1814-1820.
20. Connolly D. T., McIntyre J., Heuvelman D., Remsen E. E., McKinnie R. E., Vu L. Melton M., Monsell R., Krul E.S. and Glenn K. Physical and kinetic characterization of recombinant human cholesteryl ester transfer protein // Biochem. J. – 1996. – Vol. 320. – P. 39-47.

**Щекатоліна С. А., Жарюк В. Н.**

**Обмін ліпідами між ліпопротеїнами низької і високої щільності з урахуванням окислення ліпопротеїнів низької щільності**

**АНОТАЦІЯ**

*У роботі запропонована модифікована модель перенесення ліпідів між ліпопротеїнами низької і високої щільності (ЛПНЩ і ЛПВЩ). Модифікація стосується введення в модель обміну ліпідами в стінці судини ЛПНЩ, модифікуються під дією потоку радикалів, з ЛПВЩ. Вивчено вплив потоку радикалів, ліпідного стану організму і концентрації CETP на обмін ліпідами. Аналіз модельних розрахунків показує, що в умовах дії потоків радикалів зі швидкістю перенесення ефірів холестерину (CE) і тригліцеридів (Tg) між ЛПНЩ і ЛПВЩ змінює свій характер: CE переносяться до ЛПВЩ, а Tg - до ЛПНЩ. Така зміна характеру перенесення може вплинути на зворотний транспорт холестерину (ЗТХ).*

**Tshekatolina S. A., Garyuk V. N.**

**Lipid exchange between lipoproteins of low and high density taking into account the oxidation of low-density lipoproteins**

**SUMMARY**

*A modified model of lipid transfer between low and high density lipoproteins (LDL and HDL) has been proposed. The modification concerns the introduction of a model for the exchange between LDL modified by the flow of radicals in the vessel wall and HDL. The influence of the flow of radicals, the lipid state of the organism and the concentration of CETP on the exchange of lipids was studied. Analysis of model calculations shows that under the conditions of the action of large radical fluxes, the transfer of cholesterol esters (CE) and triglycerides (Tg) between LDL and HDL changes its character: CE is transferred to HDL and Tg - to LDL. Such a change in the nature of the transfer may have an effect on cholesterol reverse transport (RCT).*

УДК 621.384.663, 577.3, 614.715

**Zhou Huiyu<sup>1</sup>, Dragan G.S.<sup>2</sup>, Kutarov V.V.<sup>2</sup>, Galkin N.B.<sup>2</sup>, Filipova T.O.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Cheng Du Hai Guang Nuclear Power Technology Service Co. Ltd, Cheng Du, China, 610041

<sup>2</sup>Odesa I.I.Mechnikov National University, Odesa, Ukraine, 65082

Correspondent author e-mail: v.kutarov@onu.edu.ua

## **Universal description of the biofilms growth dynamic in logistic model**

*We study experimental and theoretical dependences of growth dynamics of Pseudomonas aeruginosa biofilms and dynamics of yeast biomass growth. It is revealed that the process of growth of yeast biomass passes into the state of  $t_{max}$  three times faster than the formation of biofilm. Analysis of experimental data showed that the biofilm had been continuously growing in the first three days. After the third day, the accumulation of biomass in the biofilm stopped and for the next four days of biofilm observation it remained constant, which indicates competitive mechanisms of interaction. As can be seen, the population is stable at the second stage. Basic growth regimes of proximity with different dynamic characteristics are shown.*

*The universal description of the biofilms growth dynamic was obtained. Defined parameter of the biological population growth generalized dynamics  $t^*$  uniquely characterized by  $N^*$  determining parameter and control parameters  $\alpha$  and  $\beta$ . The parameter  $\alpha$  is determined by the ratio between the radius of individual activity of the population and the characteristic size of the area. The parameter  $\beta$  is determined by competitive interactions, properties of the environment and by cell-to-cell communication. The universal model was proved for Pseudomonas aeruginosa biofilm. The results of the experiments are consistent with the calculated data.*

**Introduction.** Today, discovery of the biofilm formation process causes interest in microbiologist, biophysics and physicians.

Bacterial biofilm is a complex self-organizing form of bacterial existence. Complex three-dimensional organisation and "social behaviour" phenomena are the specific attributes of bacterial biofilms. Biofilm formation is response function on extracellular impacts of the external environment and in the other hand, on perturbations, produced by microorganisms cells.

Theoretical investigation of nonequilibrium thermodynamic of bacterial biofilms held within the framework of main theory of the biology population models [4-7]. At the same time, methods of the theoretical analysis of the biofilms growth dynamics experimental data represented slightly. Today, there is no theoretically substantiated methods for the generalization of biofilms growth dynamics experimental data.

The aim of this work is development of a theoretically substantiated method of experimental data generalization analysis in the framework of the biology populations general models.

**Theory.** Any biological population characterized first of all by activity radius and areal size [4, 5]. In the case when activity radius is bigger than areal size, such population can be characterized as well mixed and spatial effects can be ignored in its description. In the opposite case, it is necessary to consider the spatial distribution of the population.

If, in the first approximation to assume that population has a uniform distribution on the areal, all individuals in population are similar, and population density  $N(t)$  - continuously differentiable function, that local population dynamic, growth function  $F(N)$  can be represented by the next models: linear growth functions (Malthusian type models), quadratic growth functions (logistic model type), cubic growth function (Alle models type) [5, 7].

In the future, for definiteness, we will consider a logistic type of local population dynamic.

Populations with logistic model of growth is defined as follows [4, 6]:

$$F(N) = \frac{dN}{dt} = rN \left( 1 - \frac{N}{K} \right). \quad (1)$$

In equation (1) parameter  $r$  – call Malthusian, and  $K$  – environment "capacity".

It is necessary to make some clarification. Usually, a typical form of the function  $F(t)$  are not known. Natural approach in conditions of incomplete information about growth function is its representation in the form of a polynomial the minimum necessary extent is an expansion in a Taylor series in the neighbourhood of the equilibrium values of the density. The equation (1) is obtained by assuming the existence of a series expansion with integral exponent. This assumption is valid for well mixed populations.

In general, *Pseudomonas aeruginosa* growth law of logistic population written in the form:

$$F(N) = rN \left( 1 - \left( \frac{N}{K} \right)^\alpha \right). \quad (2)$$

It is clear, that when  $\alpha = 1$  we see a logistic law.

To further it is expedient to write a *Pseudomonas aeruginosa* growth law in the next way:

$$f(N) = \frac{1}{N} \frac{dN}{dt} = r \left( 1 - \left( \frac{N}{K} \right)^\alpha \right), \quad (3)$$

$f(N)$  function describes the dependence of the relative growth rate, called the Malthusian population function.

Connection with the Malthusian function and Malthusian parameter is determined by:

$$f(N)_{N \rightarrow 0} = r. \quad (4)$$

In what follows, for the generalized analysis experimental data of density of population growth  $N(t)$  appropriate to introduce a generalized Malthusian function.

$$\varphi(N) = \frac{1}{r} f(N)_{N \rightarrow 0}. \quad (5)$$

In biological populations dynamic models Malthusian parameter is defined as  $r = n - m$ , where  $n$  – "natural birth rate" and  $m$  – "natural death rate" [5, 6]. We introduce by analogy with "birth-death" Malthusian parameter for bacterial biofilms as a ratio between "lifetime" of bacterial cells in the biofilm and a "lifetime" of bacterial cells in the planctonic culture.

Precise, theoretically substantiated methods of Malthusian parameter calculation for biofilm is not exist. Therefore, subsequently, in the analysis of experimental data, Malthusian parameter of biofilm will count according to the definition (4).

To calculate the function  $N(t)$  that characterized a biofilm growth dynamic, integrating the equation (3) we obtain:

$$\int_{N_0}^N \frac{dN}{N(1-(N/K)^\alpha)} = r \int_{t_0}^t dt. \quad (6)$$

When  $\alpha = 1$ , the equation (6) is solved analytically [3]. When  $\alpha$  takes a fractional value, analytical to solved (6) is impossible. So, cut and dried equation, that describes biofilm growth dynamic is recorded like:

$$t - t_0 = \frac{1}{r} \int_{N_0}^N \frac{dN}{N(1-(N/K)^\alpha)}. \quad (7)$$

In equation (7)  $N_0$  and  $t_0$  are arbitrarily small nonzero coordinates of a point on the phase diagram, that describe biofilm growth dynamic, for which is determined a Malthusian parameter  $r$ .

For comparative analysis of the biofilms growth dynamics, obtained under different conditions, spend a similarity transformation equations (3) and (7). We introduce the following dimensionless variables:

$$t^* = \frac{t}{t_{max}}, \quad N^* = \frac{N}{N_{max}}. \quad (8)$$

$t_{max}$  and  $N_{max}$  parameters are the coordinates of a point on the phase diagram, that determining completion of the biofilm formation.

We will rewrite equations (3) and (7) in coordinates (8):

$$f(N^*) = \frac{1}{N^*} \frac{dN^*}{dt^*} = t_{max} r \left( 1 - \left( \frac{N^* N_{max}}{K} \right)^\alpha \right) \quad (9)$$

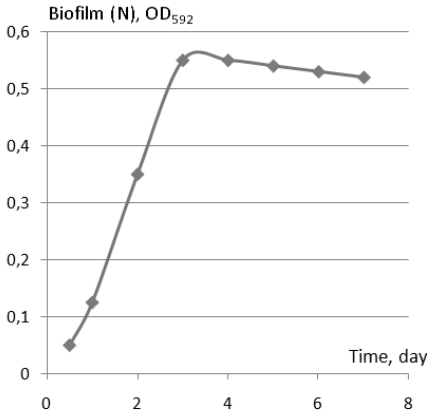
and

$$t^* = t_0^* + \frac{1}{r t_{max}} \int_{N_0^*}^{N^*} \frac{dN^*}{N^* \left( 1 - \left( N^* N_{max} / K \right)^\alpha \right)}. \quad (10)$$

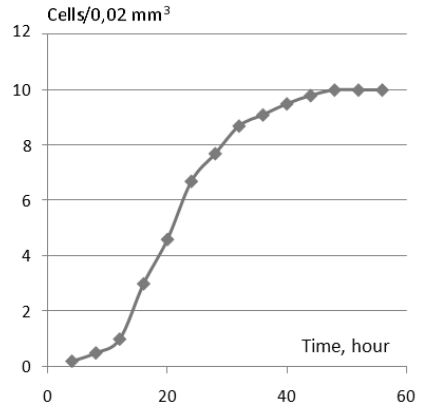
Let us analyze the equations (9) and (10). On the basis of equilibrium thermodynamics, we can show the feasibility of the following approximations:  $(t_{max}r)$  and  $(N_{max}/K)$  values of the order of unity. However, a rigorous proof of this approximation is beyond the scope of this paper. So, subsequently, we will evaluate a values of  $(t_{max}r)$  and  $(N_{max}/K)$  by experimental data.

Can also be suggested, that in a first approximation, a certain contribution to the integral in the right part of equation contribute a member  $(N^* N_{max} / K)^\alpha$ .  $t^*$  value increase with increasing of this member. So, in a first approximation, we can write the condition of dynamic similarity of the biofilm formation process (formally, biological population increasing process) in the next way:





**Fig. 1.** *Pseudomonas aeruginosa* biofilm growth dynamic



**Fig. 2.** Yeast biomass growth dynamic

$$\tau^* = S [(\beta N^*)^\alpha]. \tag{11}$$

In formula (11)  $S$  – similarity function;  $\beta$  – depends on the value of  $(t_{max}^r)$  and  $(N_{max}/K)$  and determined experimentally.

**Results and discussion.** To check the adequacy of the conditions of similarity (11) we examined two thermodynamic systems - biofilm growth dynamic (Fig. 1) and yeast biomass growth dynamic (Fig. 2) [1].

It should be noted that yeast biomass growth process passes to state  $\tau_{max}$  in three times faster than a biofilm formation.

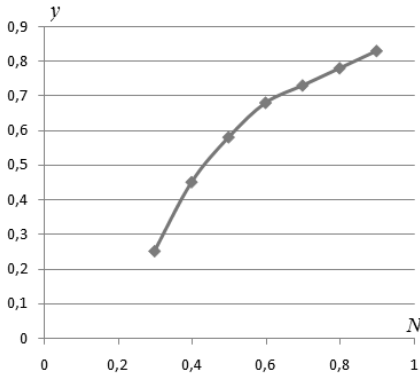
We begin analysis of experimental data with consideration of the biofilm growth dynamic of *Pseudomonas aeruginosa*. Study of the dynamics of biofilm formation during the week showed, that a biofilm was continuously growing at first three days. After the third day biomass accumulation into the biofilm stopped and on the next four days of observation biofilm mass were permanent [2].

The calculation of maltusian function  $f(N)$  for biofilm growth dynamic (Fig. 1) were performed by numerical differentiation method (Stirling interpolation formula) [3].

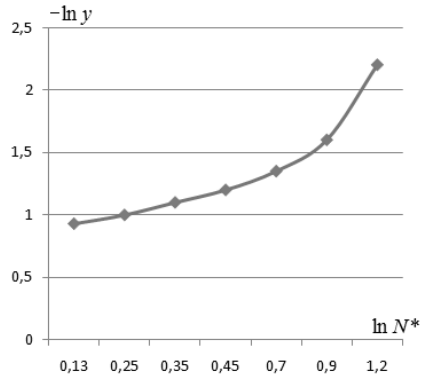
On Fig. 3 there is a dependence of  $g = 1 - \varphi(N^*)$  from  $N^*$ . Fig. 3 shows that this dependence does not meet the logistic law for which the graph of  $[1 - \varphi(N^*)]$  from  $N^*$  should be strictly straight line segment. On Fig. 3 there is a schedule of the  $\ln[1 - \varphi(N^*)]$  from  $\ln N^*$  dependence. This graph is a generalized logistic function which is expressed by equations (3). On the basis of numerical analysis graphical representation of the equation (3) as a  $\ln[1 - \varphi(N^*)]$  from  $\ln N^*$  we took the equations:

$$\varphi(N^*) = 1 - 1.68(N^*)^{1.58}, \quad 0 < N^* \leq 0.3; \tag{12}$$

$$\varphi(N^*) = 1 - 0.96(N^*)^{0.73}, \quad 0.4 \leq N^* < 1.0. \tag{13}$$



**Fig. 3.** Dependence of  $g = 1 - \varphi(N^*)$  from  $N^*$ .  $1 - \varphi(N^*) = y$



**Fig. 4.** Dependence of  $\ln[1 - \varphi(N^*)]$  from  $\ln N^*$ .  $\ln[1 - \varphi(N^*)] = \ln y$

Equations (12) and (13) allow us to calculate the generalized Malthusian function of the biofilm with a minimum relative deviation  $\pm \sigma = 7.8 \%$ .

Analysis, spent in the same sequence for yeast biomass growth dynamic, show the same deviations from the logistic law. However, in this case, the  $\ln[1 - \varphi(N^*)]$  from  $\ln N^*$  dependence is a straight line segment over the entire range  $0 < N^* < 1$ , and is written as follows:

$$\varphi(N^*) = 1 - 1.1(N^*)^{0.78} \tag{14}$$

Equation (14) allows us to calculate generalized Malthusian function of the yeasts dynamics growth with a maximum deviation  $\pm \sigma = 7.3 \%$ . Now, spend the calculation time required to reach an arbitrary state  $N^*$  for a biofilm formation process and yeasts growth with equation (7).

For a biofilm growth dynamic equation (7) written as follows:

$$t = 0.5 \left( 1 - \int_{0.05}^{N^*} \frac{dN^*}{N^* (1 - (1.39N^*)^{0.73})} \right) \quad \text{for } 0 < N^* \leq 0.3 \tag{15}$$

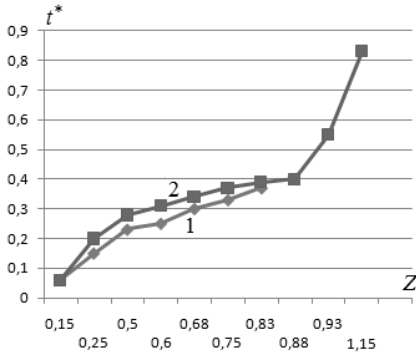
$$t = t_{0.3} + 0.5 \int_{0.03}^{N^*} \frac{dN^*}{N^* (1 - (0.04N^*)^{0.73})} \quad \text{for } 0.4 < N^* \leq 1.0 \tag{16}$$

For yeasts biomass growth dynamic:

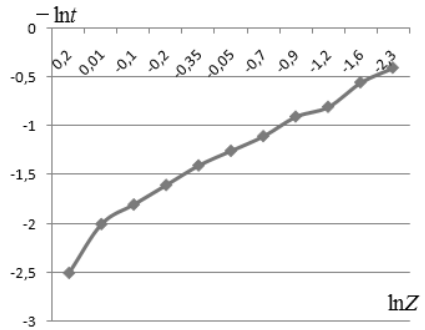
$$t = 6 + 3.33 \int_{0.33}^{N^*} \frac{dN^*}{N^* (1 - (1.13N^*)^{0.71})} \quad \text{for } 0.03 < N^* \leq 1.0 \tag{15}$$

The integration is carried out numerically by Newton-Cotes quadrature formulas [3]. The maximum relative deviation in the calculation according to the equations (15), (16), (17)  $\pm \sigma = 9.8 \%$ .

Now, consider the similarity of the dynamic behaviour of the *P. aeruginosa* biofilm and yeasts biomass defined by the formula (11). There is a dependence graph



**Fig. 5.** Universal dependence of yeasts biomass (1) and *P.aeruginosa* biofilm (2) growth.



**Fig. 6.** Universal dependence of yeasts biomass and *P.aeruginosa* biofilm growth in logarithmic coordinates

of  $t^*$  from  $Z = (\beta N^*)^\alpha$  on the Fig. 5, where  $\alpha$  and  $\beta$  are determined as a parameters of the equations (15), (16), (17). From Fig. 5 it is clear that similarity conditions defined by the formula (11) performed well enough. However, dependence  $\ln t^*$  from  $\ln Z$  (Fig. 6) has a singular point, as shown by further analysis. There is a dependence of  $\ln t^*$  from  $\ln Z$  on Fig. 6, where  $Z = 0,55$  is a breakpoint. Thus, the formula of similarity (11) must be written as follows:

$$t^* = 0.36 Z^{0.65}, \quad 0 < Z \leq 0.55; \tag{18}$$

$$t^* = 0.62 Z^{1.56}, \quad 0.55 \leq Z < 1.2 \tag{19}$$

Formulas (18) and (19) allow to calculate the universal characteristic of the bio-populations growth dynamics with maximum relative deviation  $\pm \sigma = 9.7 \%$ .

**Conclusions:**

In this paper we have developed a universal description of the biofilms growth logistic dynamic. The dynamics of growth takes place in two stages. On a second stage population is stable  $\alpha > 1$ . It was shown the essential closeness growth regimes with different dynamic characteristics.

**References:**

1. *Alekseev V.V.* Life organisms' community biophysics. // UFN. – 1976. – V. 120, № 4. – P. 647-670. (original in Russian)
2. *Galkin M. B.* The peculiarity of *Pseudomonas aeruginosa* biofilm formation in presence of the porphyrins bismuth complexes. The PhD thesis. – Kyiv, 2013. – 148 p.
3. *Korn G.A., Korn M.S.* Mathematical handbook for scientists and engineers. McGraw – Hill Book Company, INC. New York, 1961 – 719 p.
4. *Lotka A. J.* Elements of Mathematical Biology. – New York: Dover, 1956. – 485 p.
5. *Murray J.D.* Mathematical Biology (Biomathematics Vol. 19). – Berlin: Springer- Verlag, 1989. – 767 p.
6. *Nachushev A. M.* Mathematic biology equations. – M.: High School. 1995. – 301 p.

(original in Russian).

7. Okulo A. Diffusion and Ecological Problem: Mathematical Models (Biomathematics Vol. 10). – Berlin: Springer-Verlag, 1980, 254 p.

**Джоу Хуюй, Драган Г. С., Кутаров В.В., Галкін М.Б. Філіпова Т.О.  
Универсальный опис динамики роста биоплівки в логістичній моделі**

**АНОТАЦІЯ**

*Вивчаються експериментальні та теоретичні залежності динаміки росту біоплівок *Pseudomonas aeruginosa* і динаміки росту біомаси дріжджів. Виявлено, що процес зростання біомаси дріжджів переходить в стан *t*max в три рази швидше, ніж утворення біоплівки. Аналіз експериментальних даних показав, що біоплівка безперервно зростає в перші три дні. Після третього дня накопичення біомаси в біоплівці припинилося і протягом наступних чотирьох днів спостереження біоплівки було постійним, що вказує на конкурентні механізми взаємодії. Як видно, на другому етапі населення стабільно. Показані основні режими зростання близькості з різними динамічними характеристиками.*

*Отримано універсальний опис динаміки росту біоплівки. Визначений параметр узагальненої динаміки росту біологічної популяції  $t^*$  однозначно характеризується визначальним параметром  $N^*$  і параметрами управління  $\alpha$  і  $\beta$ . Параметр  $\alpha$  визначається відношенням між радіусом індивідуальної активності популяції і характерним розміром площі. Параметр  $\beta$  визначається конкурентними взаємодіями, властивостями середовища і зв'язком між осередками. Універсальна модель була доведена для біоплівки *Pseudomonas aeruginosa*. Результати експериментів узгоджуються з обчисленими даними.*

**Джоу Хуюй, Драган Г. С., Кутаров В.В., Галкин Н.Б. Филипова Т.О.  
Универсальное описание динамики роста биопленки  
в логістической моделі**

**АННОТАЦИЯ**

*Изучаются экспериментальные и теоретические зависимости динамики роста биопленок *Pseudomonas aeruginosa* и динамики роста биомассы дрожжей. Виявлено, что процесс роста биомассы дрожжей переходит в состояние *t*max в три раза быстрее, чем образование биопленки. Анализ экспериментальных данных показал, что биопленка непрерывно растет в первые три дня. После третьего дня накопление биомассы в биопленке прекратилось и в течение следующих четырех дней наблюдения биопленки было постоянным, что указывает на конкурентные механизмы взаимодействия. На втором этапе население стабильно. Показаны основные режимы роста близости с различными динамическими характеристиками.*

*Получено универсальное описание динамики роста биопленки. Определенный параметр обобщенной динамики роста биологической популяции  $t^*$  однозначно характеризуется определяющим параметром  $N^*$  и параметрами управления  $\alpha$  и  $\beta$ . Параметр  $\alpha$  определяется отношением между радиусом индивидуальной активности популяции и характерным размером площади. Параметр  $\beta$  определяется конкурентными взаимодействиями, свойствами среды и связью между ячейками. Универсальная модель была доказана для биопленки *Pseudomonas aeruginosa*. Результаты экспериментов согласуются с вычисленными данными.*

УДК 539.2:541.18

**Popovskii A.Yu.<sup>1</sup>, Altoiz B.A.<sup>2</sup>, Butenko A.F.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> National University „Odessa Maritime Academy“, e-mail: [alexejpopovskij57@gmail.com](mailto:alexejpopovskij57@gmail.com)

<sup>2</sup> Odessa I.I. Mechnikov National University, e-mail: [altoiz41@gmail.com](mailto:altoiz41@gmail.com)

## **Structural characteristics of the epitropic liquid-crystalline layer of oleic acid**

*The investigations of the structure of thin oleinic acid interlayers bounded by quartz and metallized substrates were carried out by the method of admixed adsorption dichroism. It allowed us to determine structural the existence of epitropic liquid crystalline layers of this compound and the peculiarities of structural parameters, which affect on the important lubricant characteristic.*

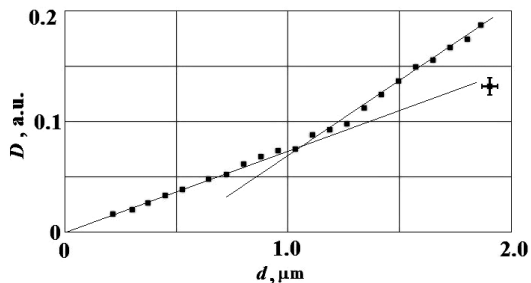
**Introduction.** The phenomenon of formation of structured wall-adjacent epitropic-liquid crystalline (ELC) layers [1] near the lyophilic substrates [1] has now been established for a number of liquids. These layers (formerly called boundary layers) affect the stability of dispersed systems and character of coagulation processes. For example, the fact of the existence of a ELC layer on aerosol particles significantly reduces the rate of sedimentation and the value of the specific volume of the sedimentation residuum[2]. In recent years, ELC layers formed by unsaturated aliphatic hydrocarbons (alkanes) on conductive substrates attracted the intent attention of researchers [3]. This attention is connected with the fact that alkanes are the basis of modern lubricating mineral oils [4-6], and ELC layers in friction tribounits increase the wear resistance of mechanisms [7-9]. The phenomena of the organization of such structured oil layers at rubbing surfaces usually is due to anti-wear additives (fatty acids).

It was noticed that a surfactant additive of oleic acid (OA) to alkanes and motor oils (at a concentration less than 3-5%) leads increases their “lubricity” [10] and to enlarging of the thickness of their ELC layers [6,11]. It may be connected with the fact that the OA is capable to organize the ELC phase by itself. Then it is possible to expect that the established lyophilicity of metal to OA and peculiarities of the molecular structure of the latest will provide a significant thickness of the ELC layers at the metal surfaces of the friction unit. The study of the properties and features of such OA phase state, in turn, may help to explain the effect of lubricant doping with OA and improve the theoretical model [12] of this phase state.)

The results of this investigation are important and interesting in the applied aspect, as OA is widely used (possible due to the formation of its ELC layers at the interphase boundaries) in various areas of production, such as:

- a plasticizer for paintwork materials production, e.g. it increases the sheeting (the ability of powder flakes to be parallel to the surface during flotation) of aluminum powder in a paint;
- a stabilizer of invert emulsions in oil-based drilling fluids and emulsifiers (adding 0.1 wt.% of OA to bitumens increases their ability to emulsification [13]);
- a solubilizing agent and emulsifier in aerosols;





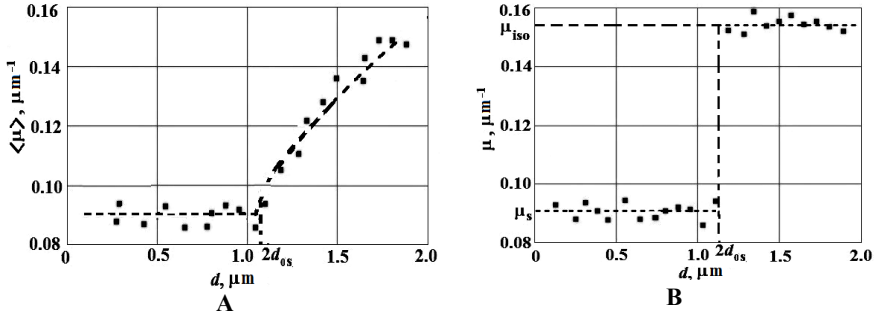
**Fig. 1.** Thickness dependence of the “guest” optical density in oleic interlayer bounded by quartz ( $t = 22.0^\circ\text{C}$ )

rated chemical bonds and therefore its absorption bands are located in the region of the vacuum ultraviolet ( $\nu > 50000 \text{ cm}^{-1}$ ). Therefore, we modified [18] “guest-host” method well-known in LC researches [19]. The structure of the OA-matrix (the “host”) in the interlayer was determined by the analysis of the absorption dichroism (in the region of the atmospheric ultraviolet) of the impurity dye (the “guest”) dissolved in the OA. The information obtained in this way is reliable in case of a sufficient isomorphism degree (the comparability of the molecular shape of the matrix and the impurity).

We used popular organic dyes (“sudan red” and “sudan black”) with high molar extinction and solubility values as “guests” in order to study the structure of ELC phase in alkane liquids. The positions of their absorption bands maxima are  $\lambda_{\text{max}} \sim 0.606 \mu\text{m}$  and  $\lambda_{\text{max}} \sim 0.472 \mu\text{m}$ , respectively. More elongated, in comparison with “sudan red”, molecules of “sudan black” are better comparable in length ( $l_0 \approx 20,5 \text{ \AA}$ ) and in shape with OA molecules, i.e. the degree of isomorphism with the host molecules is higher for them. However, we mainly used the sudan red dye ( $l_0 \approx 10,5 \text{ \AA}$ ) in our experiments. This is due to its higher degree of solubility, greater extinction value, and thus, the possibility of a more qualitative study of the properties of ultrathin ( $d \sim 0.2 \div 10 \mu\text{m}$ ) layers of solutions with a low ( $C \sim 1 \div 2 \text{ weight\%}$ ) concentration [17], in which the presence of a “guest” does not affect the matrix “host” structure.

The dichroism of the “guests” was measured in the wedge-like heterophase (containing ELC layers) interlayers of studied liquids. A special compression of optically polished quartz glasses (the cell windows) formed a gap with a slope of  $\alpha \sim 0.3 \div 0.4 \mu\text{m} / \text{mm}$ . Its topology was determined from an interferogram obtained by scanning an unfilled cell [16]. After the gap had been filled up with the studied liquid, light transmission  $I(d)$  was measured with light probe scanning through the thickness of the wedge-like layer  $d$  at the wavelength of the impurity absorption maximum.

Experimental values of optical density  $D = \ln(I_0/I)$ , (normalized to the maximum light transmission  $I_0$  in the zone of substrates optical contact), for OA interlayers bounded by quartz glasses for various thicknesses  $d$  are presented in fig. 1.



**Fig. 2.** Thickness dependence of the linear absorption coefficient of OA interlayer between dielectric (quartz) substrates (a – average value, b – local value).  $t=22.0^{\circ}\text{C}$ ,  $\Delta T= 5.7\text{ K}$

An essential deviation of this dependence from the linear Bouguer law form indicates the fact of heterogeneity - the heterophase nature of the OA layer. The  $D(d)$  dependence was approximated by a broken line (as shown in Fig. 1). The slope of the straight lines correspond to the linear absorption coefficients was chosen from the condition of the total dispersion minimum.

It should be noted that the measurement of dichroism (in the “ray-of-light” geometry) is possible only in the case of transparency of the cell windows (quartz in described experiments). Transparent windows with metallized surfaces were produced by vacuum thermal deposition of a thin ( $h \sim 0.18\ \mu\text{m}$ ) semitransparent metallic layer (nichrome N20C80) on a quartz substrate surface. For the strengthening (higher degree of nichrome adhesion to the quartz substrate) of this metal layer, the quartz plates were heated to a temperature of  $\sim 250^{\circ}\text{C}$  in the vacuum chamber during deposition.

Metal substrate usually provides the ELC layer with a greater value of equilibrium thickness ( $d_s \sim 1,0\ \mu\text{m}$ ) [16] as compared with a dielectric substrate ( $d_s \sim 0,3\ \mu\text{m}$ ). Therefore another technique was used to form for the formation of a wedge-like gap between metallized substrates — a thin aluminum spacer ( $H \sim 10\ \mu\text{m}$ ) was disposed in one of its edges perpendicular to the scanning direction. The further compression of the cell windows formed a linear wedge-like gap with a slope of about  $\alpha \sim 1.2\ \mu\text{m}/\text{mm}$ .

A noticeable contrast of the interference pattern obtained during gap scanning resulted from the higher value of light reflectance coefficient in case when metallized substrates were used instead of quartz ones. This result was observed even when gap was filled with fluid. Therefore, essential oscillations appeared on the curve of optical density thickness dependence in the region of the wedge top. They were smoothed by using the moving average method.

**Results of research and analyses.** The dependence  $D(d)$ , which is shown in fig.1, makes it possible to establish the thickness dependencies of the average and local (at the distance  $d$  from the substrate) values of the linear light absorption coefficient of the studied interlayer. These values are determined by equations  $\langle \mu \rangle = D/d$



and  $\mu_l = dD/dl$ . These dependencies for the OA interlayer bounded by quartz substrates are depicted in Fig. 2.

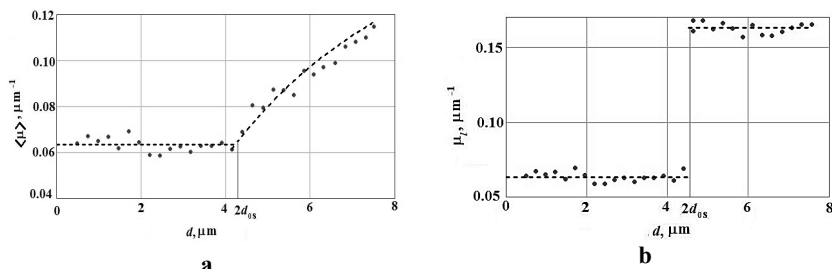
Analysis of the curve behavior from fig.2a shows that the average value  $\langle \mu \rangle$  increases with the interlayer thickness from the lower values up to the bulk one, at that the values of the average and local absorption coefficients practically coincide in the region of small thicknesses. When the interlayer thickness exceeds the critical value  $2d_{0s}$ , average absorption coefficient  $\langle \mu \rangle$  monotonously increases with asymptotically approaching the value for isotropic liquid in bulk. We used the value  $\Delta T = T - T_m$ , as this temperature difference characterizes the ELC phase properties. It is precisely this difference that determines the existence of ELC phase and its main properties (in particular equilibrium thickness  $d_{0s}$ ) according to the developed theoretical model [12].

It is logical to assume that the alteration of the absorption coefficient is due to the change of the interlayer structure. So this interlayer may be represented in a form of the three-component system – two wall-adjacent layers and the isotropic bulk liquid between them. The wall-adjacent layer is characterized by the almost constant value of the absorption coefficient  $\mu_s$  and, accordingly, almost constant degree of ordering  $S$  (both for the dissolved “guest”-molecules and the molecules of the matrix). A centrally disposed layer of isotropic liquid is characterized by zero degree of ordering and a constant value of absorption coefficient  $\mu_{iso} > \mu_s$ . The lower value of the absorption coefficient in the wall-adjacent layer serves as a evidence of homeotropic orientation of molecules there.

Differentiation of the  $D(d)$  dependence reveals the jump-like behavior of the  $\mu_l(d)$  dependence – the value of  $\mu_l$  increases from  $\mu_s$  to  $\mu_{iso}$ . Naturally, the jump corresponds to the salient point of the  $D(d)$  curve. The ratio of the  $\mu_s$  and  $\mu_{iso}$  allows us to calculate the value of the order parameter of the wall-adjacent ELC layer –  $S = 1 - \mu_s/\mu_{iso}$ .

It has been established that OA interlayers bounded by quartz substrates are characterized by the following values of structural parameters –  $S=(0,40\pm 0,03)$  and  $d_{0s}=(0,56\pm 0,04)$   $\mu\text{m}$  at  $\Delta T=5,7$  K. Let us compare these values with the structural parameters of ELC layer of *n*-hexadecane –  $\text{CH}_3\text{--}(\text{CH}_2)_{14}\text{--CH}_3$  [17]. This compound was chosen for a comparison because of its molecular parameters are very close to OA ones – molecule is a nonpolar “straight rod” with molecular size  $l_0 \sim 23,2$  Å and contains 16 carbon atoms. It should be noted here that structural parameters of *n*-hexadecane ELC layer ( $S \sim 0,23$ ,  $d_{0s} \sim 0,23$   $\mu\text{m}$ ) [17] are nearly half the value of OA layer at the same quartz substrates and temperature difference  $\Delta T$ .

The measurements of OA ELC layer parameters formed between metallized substrates were essentially more interesting and important for applications. Fig.3 presents the thickness dependencies of average and local absorption coefficient determined for this type of interlayers at temperature  $20,6^\circ\text{C}$  ( $\Delta T=4,3$  K). The values main structural parameters of such ELC state were –  $S=(0,49\pm 0,03)$  and  $d_{0s}=(2,46\pm 0,05)$   $\mu\text{m}$ . Separately it should be noted that the ELC equilibrium thickness  $d_{0s}$  is nearly 8 times higher compared with the same value measured near the quartz surface.



**Fig. 3.** Thickness dependencies of linear absorption coefficient of OA interlayer bounded by metallized quartz substrats (a–average value, b – local value)

Let us compare these results with the following data obtained for heterophase *n*-hexadecane substrate bounded interlayers. The temperature dependence of ELC layer equilibrium thickness  $d_{0s}$  was measured by different experimental techniques – rotation viscosimetry [21] birefringence measurement in gap light-guide [16] and admixed dichroism [20]. The last method allowed us to establish not only the equilibrium thickness, but the order degree value as well. At the same temperature  $\Delta T$  these values were  $d_{0s} = (1.4 \pm 0.2) \mu\text{m}$  and  $S \sim (0.28 \pm 0.04)$ . It is significant that the values of these parameters are 1.5–3 times less than in the case of oleic acid ELC layers.

**Discussion and conclusion.** The measurements of micron OA interlayers (in gaps between quartz plates and metallized quartz plates) indicate the fact that in such interlayers ELC layers really exist as it was expected. On conductive substrates, the order parameter  $S$  of these layers is higher compared with dielectric surfaces and their equilibrium thickness  $d_{0s}$  is almost half the order of magnitude higher. The equilibrium thicknesses  $d_{0s}$  of the OA and *n*-hexadecane ELC phases formed at the same substrates also essentially differ.

Highly likely, such differences are due to the special structure of OA molecules – their shape, size, polarity, and the presence of active end groups which provide the effect of surface adsorption. The equilibrium thickness of the OA ELC layer near the metal surface is also significantly larger than near quartz one. It maybe related to the higher value of the adsorption energy of OA molecules to the metal substrate. This energy value plays a significant role in the formation mechanism of the ELC phase [12], and it is related to the effect of wettability of the substrate by the liquid. The difference in the lyophilicity of OA to quartz and to metal is confirmed by our measurements of the equilibrium contact angle  $\vartheta$  of “sitting” OA droplets. This liquid wets quartz substrate noticeably worse than metal one: contact angle is  $\vartheta \approx 17^\circ$  in case of quartz and  $\vartheta \approx 13^\circ$  for a metal substrate, for which a steel 1X12H2BMΦ (Johansson gage plates) was used. It means that the steel surface is more lyophilic to OA, which correlates with the literature data [22].

The above-mentioned characteristics of OA molecules and their ability of the ELC phase formation are obviously determine the effect of doping of alkanes and

motor oils with OA additives. It should be noted that the precise understanding of the nature of this action should clarify the nature of OA ELC state. It will also clarify the difference between OA and well studied [16] – nitrobenzene which consists of polar molecules with smaller molecular size value  $l_0 \approx 8,5 \text{ \AA}$ . For the further development of theoretical model [12] of the ELC state, it is certainly necessary to establish the effect of temperature influence on the OA ELC phase properties. Also the future study of OA ELC rheological characteristics is especially important for applications as well.

### References:

1. *Derjaguin B. V., Altoiz B. A., Nikitenko I. I.* Epitropic Liquid Crystal layers of Nonmesogens on Quartz Substrate // Journal of Colloid and Interface Science. 1991. – Vol.145. – №2. – P. 441-446.
2. *Поповский Ю.М.* Влияние граничной фазы на устойчивость и объем осадка суспензии аэросила в нитробензоле – М.: Наука, 1974. С. 242-245.
3. *Веттегрень В. И., Тупицына А. И.* Исследование структуры тонких слоев гексадекана на металлической подложке методом ИК-спектроскопии // Письма в Журнал технической физики. – 1998. – Т. 24. – №. 10. –С.24-27.
4. *Петров А.А.* Углеводороды нефти – М.: Наука, 1974. 264 с.
5. *Сюняев З. И.* Нефтяные дисперсные системы М.: Химия, 1990. -226 с.
6. *Фукс Г. И.* Вязкость и пластичность нефтепродуктов. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 328 с.
7. *Мур Д.* Основы и применения трибоники. М.: Мир, 1978. – 488 с.
8. *Кириян С. В., Алтоиз Б. А.* //Трение и износ. 2012. Т.33, Вып.4. С. 367–372.
9. *Гаркунов Д.Н.* Триботехника. М.: МСХА, 2001. – 424 с.
10. *Папок К.К.* Смазочные масла. М.: Воениздат, 1962. –117 с.
11. *Алтоиз Б.А. Кириян С.В.* Структурированные приповерхностные слои нормальных алканов // ИФЖ.- 2010.- Т.83.- №3. – С.608-613.
12. *Алтоиз Б. А., Бондарев В. Н., Шатагина Е. А., Кириян С. В.* Модель организации эпитропной жидкокристаллической фазы // Журнал технической физики. –2014. – №7. – С. 58-61.
13. Физико-химические свойства индивидуальных углеводородов / Под ред. В. М. Татевского. – М.: 1960. – 412 с.
14. Химический энциклопедический словарь под ред., Кнунянц И.Л. – Москва: Советская энциклопедия, 1983. – 407 с.
15. *Жен П. Де.* Физика жидких кристаллов. – Москва: Мир, 1977. – 396 с.
16. *Алтоиз Б. А., Поповский Ю. М.* Физика приповерхностных слоев жидкости. – Одесса: Астропринт, 1996. – 153 с.
17. *Altoiz B.A., Popovskii A.Yu., Butenko A.F.* Equilibrium parameters of a structured n-hexadecane layer// Physics of aerodisperse systems. – 2017. – № 54. – С. 35-44.
18. *Дерягин Б.В., Алтоиз Б.А., Поповский Ю.М.* Ориентационно упорядоченные пристенные слои предельных углеводородов и их производных на поверхности кварца // ДАН СССР. – 1991. – Т.317. – №1. – С. 130-134.

19. *Блинов Л.М.* Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. Москва: Наука, 1978. – 384 с.
20. *Алтоиз Б.А., Бутенко А.Ф., Кириян С.В.* Эпитропно-жидкокристаллический слой гексадекана в реологической модели гетерофазной прослойки // Журнал технической физики. – 2018. – Т. 88. – Вып.1. – С. 5-9.
21. *Кириян С. В., Алтоиз Б. А.* Вязкостно-температурные зависимости минерального моторного масла 15W40 в микронных прослойках и структурные характеристики его квазиджидкокристаллических пристеночных слоев // Трение и износ. – 2012. – Т.33. – Вып. 4, – С. 367-372.
22. *Зимон А. Д.* Адгезия жидкостей и смачивание. – Москва: Химия, 1974. – 416 с.

***Поповский А.Ю., Алтоиз Б. А., Бутенко А. Ф.***

### **Структурные характеристики ЭЖК слоя олеиновой кислоты**

АННОТАЦИЯ

Исследования строения тонких прослоек олеиновой кислоты между кварцевыми и металлизированными подложками методом измерения дихроизма молекул «гостей» позволили установить существование эпитропно-жидкокристаллических слоев этой жидкости и отличительные особенности их структурных параметров, определяющих ключевые характеристики смазывающих материалов.

***Поповський О.Ю., Алтоїз Б. А., Бутенко О. Ф.***

### **Структурні характеристики ЕРК шару олеїнової кислоти**

АНОТАЦІЯ

*Дослідження будови тонких прошарків олеїнової кислоти між кварцовими та металізованими підкладками методом вимірювання дихроїзму домішкового поглинання дозволили визначити існування епітропно-рідкокристалічних шарів цієї рідини та відмінні особливості їх структурних параметрів, які визначають ключові характеристики змащуючих матеріалів.*

---

## ТЕПЛОМАСООБМІН

---

УДК 536.4, 622.6

**Черненко А. С., Корчагина М. Н., Калинин В. В.**

*Одеський національний університет імені І. І. Мечникова*

*E-mail: teplophys@onu.edu.ua*

### **Зажигание и горение частиц древесного угля в азотно-кислородных смесях комнатной температуры. Часть II. Аналитическое обоснование.**

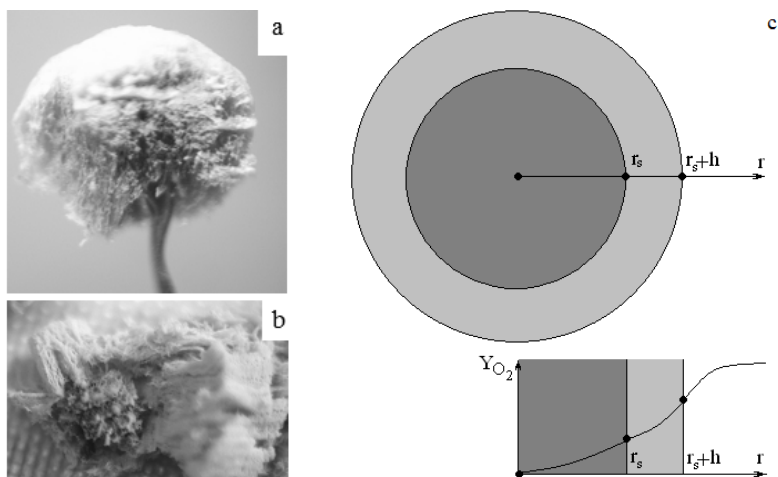
*Проводится теоретическое обоснование поведения пористой частицы древесного угля, которая горит в неподвижном воздухе комнатной температуры. Показано, что наличие зольного слоя на поверхности частицы, возникающего в процессе горения, приводит к качественным особенностям изменения температуры и диаметра частицы.*

**Введение.** В работе [1] экспериментально изучалось зажигание и дальнейшее горение крупных частиц древесного угля в воздухе комнатной температуры. Показано влияние зольного слоя, начального диаметра частицы и скорости обдува холодным воздухом на динамику изменения температуры, диаметра и плотности частицы при ее горении.

Наличие зольного поверхностного слоя определяет динамику изменения температуры, диаметра и плотности пористой зольной частицы. Наличие зольного поверхностного слоя уменьшает теплообмен излучением частицы древесного угля с окружающими телами. Поскольку температура частицы определяется скоростью диффузии кислорода через поверхностный слой, то сдувание этого слоя в результате обтекания потоком газа способствует повышению температуры частицы в процессе выгорания частицы. Причиной служит повышение скорости тепловыделения вследствие возрастания массопереноса кислорода к единице реакционной поверхности в суммарном тепловом балансе более сильное, чем возрастание теплообмена с газом за счет существенной доли теплового излучения в суммарных теплопотерях.

Решение квазистационарной плоской задачи диффузии в предположении горения в диффузионной области и малости внешнего сопротивления в сравнении с сопротивлением зольной оболочки представлено в [2]. Однако, полученный параболический закон нарастания зольного слоя применим при значительных его толщинах.

В работе [3] теоретически рассматривается воспламенение и горение одиночной частицы высокозольного угля с учетом возможного смены агрегатного состояния золы и начальных размеров зольных включений. Принималось, что по мере выгорания частицы, на внешней поверхности накапливалась зола в виде сферических частиц, занимающих часть внешней поверхности частицы.



**Рис. 1.** Частица со слоем золы (а и б) и распределение концентрации кислорода по радиальной координате (с)

На внешней поверхности горящих частиц древесного угля, массовая доля золы которого составляет около 2%, образуется равномерный слой, который не плавится [1].

**Целью данной работы** является аналитическое обоснование качественных отличий временных зависимостей температуры частицы древесного угля при наличии и отсутствии золного слоя.

**Постановка задачи.** Температуры горения частиц древесного угля в воздухе комнатной температуры сравнительно невысокие (до 1200 К). Поэтому химическое преобразование углеродной частицы в газообразные продукты, в основном, определяется двумя экзотермическими реакциями, идущими параллельно



Скорости этих химических реакций (I) и (II) по кислороду пропорциональны массовой концентрации кислорода на поверхности частицы и увеличиваются с ростом температуры по закону Аррениуса

$$\begin{aligned} (W_{O_2})_{I,s} &= k_1 \rho_{gs} Y_{O_2,s}, & (W_{O_2})_{II,s} &= k_2 \rho_{gs} Y_{O_2,s} \\ k_1 &= k_{01} \exp\left[-\frac{E_1}{RT}\right], & \rho_{gs} &= \rho_{g0} \frac{T_0}{T}, & k_2 &= k_{02} \exp\left[-\frac{E_2}{RT}\right], \end{aligned}$$

где  $\rho_{gs}$  – плотность газа на поверхности частицы, кг/м<sup>3</sup>;  $k_1, k_2$  – константы скоростей химических реакции (I) – (II), м/с;  $k_{0i}$  – предэкспоненты;  $E_i$  – энергии активации химических реакции, Дж/моль;  $T$  – температура частицы, К;  $Y_{O_2,s}$  – массовая доля кислорода на поверхности частицы,  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К).

Уменьшение диаметра частицы обусловлено химическими реакциями (I), (II) на ее внешней поверхности [4]:

$$-\frac{1}{2}\rho \frac{\partial d}{\partial t} = \frac{M_C}{M_{O_2}}(k_1 + 2k_2)\rho_{gs}Y_{O_2,s}, \quad d(t=0) = d_b; \quad (1)$$

Химическое преобразование углерода на поверхности пор в газообразные компоненты определяет уменьшение плотности частицы со временем согласно закону [4]

$$-\frac{1}{6}d \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{M_C}{M_{O_2}} \frac{k_1 + 2k_2}{k_1 + k_2} k_v \rho_{gs} Y_{O_2,s}, \quad \rho(t=0) = \rho_b. \quad (2)$$

$$k_v = \frac{2D_v}{d}(\text{Se}_v \text{cthSe}_v - 1), \quad \text{Se}_v = \sqrt{\frac{(k_1 + k_2)r_s^2 F_v}{D_v}},$$

где  $k_v$  – эффективная константа внутреннего реагирования кислорода с углеродом; м/с,  $\text{Se}_v$  – внутренний критерий Семенова, определяющий отношение скорости реагирования кислорода внутри пор к его массопереносу;  $D_v$  – коэффициент внутренней диффузии, м<sup>2</sup>/с,  $F_v$  – удельная поверхность пор, м<sup>-1</sup>.

Коэффициент внутренней диффузии и удельная поверхность пор выражаются через пористость частицы [5, С. 84]:

$$D_v = \chi^2 \cdot D_g, \quad D_g = D_{g0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^n, \quad \chi = 1 - \frac{\rho}{\rho_{real}},$$

$$\frac{F_v}{F_{v0}} = \frac{\chi(1-\chi)}{\chi_b(1-\chi_b)} = \left( \frac{1-\rho/\rho_{real}}{1-\rho_b/\rho_{real}} \right) \cdot \frac{\rho}{\rho_b},$$

где  $D_{g0}$  – коэффициент диффузии кислорода в воздухе при температуре  $T_0$ , м<sup>2</sup>/с;  $\chi$  – пористость частицы,  $F_{v0}$  и  $\chi_0$  – начальная удельная поверхность пор и пористость;  $\rho_{real}$  – плотность сплошного вещества частицы. Вторая степень пористости в зависимости коэффициента внутренней диффузии учитывает извилистость пор.

**Влияние зольного слоя на скорость реагирования частицы кокса.** Скорость тепловыделения  $q_{ch}$  на единице реакционной поверхности частицы в результате поверхностного и внутреннего реагирования определяется тепловыми эффектами и скоростями химических реакций на поверхности и в объеме частицы [4]:

$$q_{ch} = (Q_1 k_1 + Q_2 k_2)(1-A) \left( 1 + \frac{k_v}{k_1 + k_2} \right) \rho_{gs} Y_{O_2,s}$$

где  $Q_1, Q_2$  – тепловые эффекты химических реакций (I) и (II), рассчитанные на единицу массы кислорода, Дж/кгО<sub>2</sub>,  $A$  – зольность угля.

Для определения концентрации кислорода на поверхности частицы кокса необходимо решить задачу массопереноса кислорода в газовой смеси и внутри зольного слоя.

На внешней поверхности частицы (нет стока кислорода) выполняется равенство

$$\beta \rho_g (Y_{O_2,0} - Y_{O_2,h}) = D_z \rho_{gs} \left. \frac{dY_{O_2}}{dr} \right|_{r=r_s+h=0}, \quad (3)$$

где  $Y_{O_2,0}$ ,  $Y_{O_2,h}$  – массовые доли кислорода в газовой среде и на поверхности зольного слоя;  $\beta$  – коэффициент массопереноса кислорода в газовой смеси, м/с;  $D_z$  – коэффициент диффузии кислорода внутри зольного слоя, м<sup>2</sup>/с.

На внутренней поверхности зольного слоя или поверхности углеродной частицы выполняется равенство (подводящий кислород расходуется в химических реакциях на внешней поверхности кокса и внутри его пор)

$$D_z \rho_{gs} \left. \frac{dY_{O_2}}{dr} \right|_{r=r_s+0} = (k_1 + k_2 + k_v) \rho_{gs} Y_{O_2,s}. \quad (4)$$

Профиль концентрации кислорода внутри сферического слоя получается из решения задачи диффузии:

$$Y_{O_2} = Y_{O_2,s} + (Y_{O_2,h} - Y_{O_2,s}) \frac{\frac{1}{r_s} - \frac{1}{r}}{\frac{1}{r_s} - \frac{1}{r_s + h}}. \quad (5)$$

В результате подстановки (5) в (3) и (4) получим систему уравнений для определения концентрации кислорода на внутренней поверхности зольного слоя  $Y_{O_2,s}$ :

$$\begin{cases} \beta \rho_g (Y_{O_2,0} - Y_{O_2,h}) = D_z \rho_{gs} (Y_{O_2,h} - Y_{O_2,s}) \frac{r_s}{(r_s + h)h}, \\ D_z \rho_{gs} (Y_{O_2,h} - Y_{O_2,s}) \frac{(r_s + h)}{r_s h} = (k_1 + k_2 + k_v) \rho_{gs} Y_{O_2,s}. \end{cases}$$

Отсюда искомая концентрация  $Y_{O_2,s}$  равна

$$Y_{O_2,s} = Y_{O_2,0} \cdot \left( 1 + \frac{(k_1 + k_2 + k_v) \rho_{gs}}{\beta \rho_g} \left( 1 + \frac{h}{r_s} \right)^{-2} + \frac{(k_1 + k_2 + k_v) \rho_{gs}}{D_z \rho_g / h} \left( 1 + \frac{h}{r_s} \right)^{-1} \right)^{-1}. \quad (6)$$

При приближении толщины слоя золы к нулю ( $h \rightarrow 0$ ) приходим к известному выражению без учета стефановского течения:

$$Y_{O_2,s} = Y_{O_2,0} \frac{\beta \rho_g}{(k_1 + k_2 + k_v) \rho_{gs} + \beta \rho_g}.$$

Если внешнее диффузионное сопротивление мало в сравнении с сопротивлением зольной оболочки, то имеем



$$Y_{O_2s} = Y_{O_2,0} \cdot \left( 1 + \frac{(k_1 + k_2 + k_v) \rho_{gs}}{D_z \rho_g / h} \left( 1 + \frac{h}{r_s} \right)^{-1} \right)^{-1}.$$

Для выяснения скорости нарастания толщины золыного слоя примем тот факт, что на месте выгоревшей части коксовой частицы остается только лишь зола. Следовательно, можно принять равенство объема образованного слоя зола и объема выгоревшей части коксовой частицы. Это эквивалентно равенству:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial d}{\partial t}, \quad h(t=0) = h_0. \quad (7)$$

Коэффициент внутренней диффузии кислорода  $D_z$  внутри золыного слоя выражается через порозность слоя  $\chi_z$ :

$$D_z = \chi_z^2 \cdot D_g.$$

**Теплообмен частицы со слоем золы.** На внешней поверхности золыного слоя частицы выполняется равенство

$$\alpha(T_h - T_g) = -\lambda_z \frac{dT}{dr} \Big|_{r=r_s+h-0}, \quad (8)$$

$$\alpha = \frac{\lambda_g Nu}{d}, \quad \lambda_g = \lambda_{g0} \left( \frac{T_*}{T_0} \right)^n, \quad T_* = \frac{T + T_g}{2}; \quad Nu = 2 + 0.16 Re_{eff}^{2/3},$$

$$Re_{eff} = \sqrt{0.5 Gr} = \sqrt{0.5 \frac{g(d+2h)^3(T-T_g)}{273\nu_g^2}},$$

а на внутренней поверхности золыного слоя:

$$q_g = \alpha_{ef}(T_s - T_g) = -\lambda_z \frac{dT}{dr} \Big|_{r=r_s-0}, \quad (9)$$

где  $T_g, T_{gh}$  – температуры газовой среды и внешней поверхности золыного слоя;  $\alpha, \alpha_{ef}$  – коэффициент теплообмена с газовой смесью на внешней поверхности золыного слоя и эффективный на внутренней, Вт/(м<sup>2</sup>К);  $\lambda_z$  – коэффициент теплопроводности внутри золыного слоя, Вт/(м·К),  $T_g$  – температура газа на границе приведенной пленки;  $T$  – температура поверхности частицы;  $\lambda_g$  – коэффициент теплопроводности газа, Вт/(м·К);  $Nu$  – число Нуссельта;  $\nu_g$  – коэффициент кинематической вязкости воздуха, м<sup>2</sup>/с.

Профиль температур получаем из решения задачи теплопроводности внутри слоя:

$$T - T_s = (T_h - T_s) \frac{\frac{1}{1} - \frac{1}{\frac{r}{r_s + h}}}{\frac{1}{1} - \frac{1}{\frac{r}{r_s}}}. \quad (10)$$

В результате подстановки (10) в (8) и (9) получим систему уравнений для определения плотности теплового потока на внутренней поверхности зольного слоя  $q_g$ :

$$\begin{cases} \alpha(T_h - T_g) = \lambda_z (T_s - T_h) \frac{r_s}{(r_s + h)h}, \\ \lambda_z (T_s - T_h) \frac{r_s + h}{r_s h} = q_g \end{cases}$$

Отсюда искомая величина  $q_g$  равна

$$q_g = \alpha \left(1 + \frac{h}{r_s}\right)^2 (T - T_g) \left(1 + \frac{\alpha h}{\lambda_z} \left(1 + \frac{h}{r_s}\right)\right)^{-1}. \quad (11)$$

Первый множитель, содержащий толщину зольного слоя, учитывает влияния увеличения внешней поверхности на теплоотдачу, а второй – уменьшение теплоотдачи за счет торможения теплопроводностью в слое золы.

При приближении толщины слоя золы к нулю ( $h \rightarrow 0$ ) приходим к известному выражению без учета стефановского течения:

$$q_g = \alpha(T - T_g).$$

**Излучение через слой золы.** Плотность теплового потока излучением частицы со стенками  $q_w$  описывается законами Кирхгофа и Стефана-Больцмана:

$$q_w = \varepsilon \sigma (T^4 - T_w^4),$$

где  $\varepsilon$  – коэффициент черноты частицы;  $T_w$  – температура стенок, К.

По мере нарастания слоя золы коэффициент черноты частицы должен смениться от значения для древесного угля ( $\varepsilon_1 = 0.78$ ) до значения золы (взят  $\varepsilon_2 = 0.35$ ). Уменьшение плотности теплового излучения в слое золы можно учесть через длину свободного пробега излучения, которую можно оценить как диаметр макропор в слое золы ( $l_{rad} \approx d_p$ , взято  $l_{rad} \approx 200$  мкм):

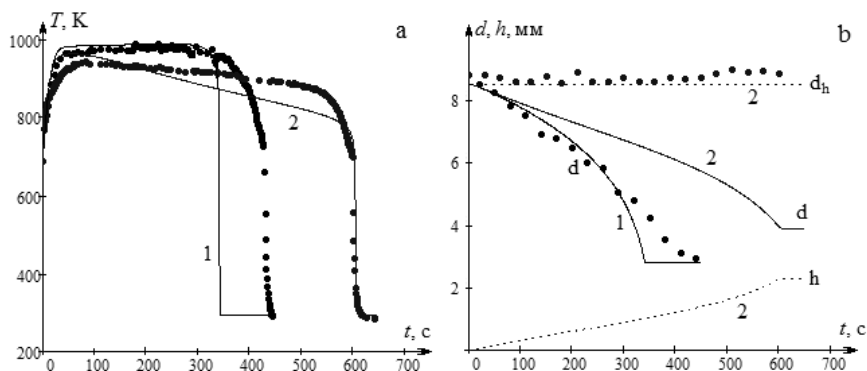
$$\varepsilon = \varepsilon_1 \left(1 - \exp\left(-\frac{l_{rad}}{h}\right)\right) + \varepsilon_2 \exp\left(-\frac{l_{rad}}{h}\right).$$

Таким образом, по мере нарастания зольной пленки происходит плавная смена коэффициента черноты, учитывающая поглощение и излучение самого слоя золы.

**Учет теплоотвода через терморпару.** В опытах [1] крупные частицы древесного угля располагались на хромель-алюмелевой терморпаре с диаметрами электродов  $d_m = 0.3$  мм. Для учета теплоотвода через оба электрода использовалась формула, полученная в [6]:

$$Q_t = 2 \cdot \pi d^2 q_t = 2 \cdot \frac{\pi}{2} d_m \lambda_m \sqrt{2 \frac{\lambda_g}{\lambda_m}} (T - T_g).$$

Множитель 2 учитывает теплоотвод через оба электрода ввиду того, что для копей и алюмеля соответствующие коэффициенты теплопроводности



**Рис. 2** Временные зависимости температуры центра частицы (а), диаметра частицы и толщины золяного слоя (б) с отсутствием (кривые 1) и наличием золяного слоя на поверхности горячей частицы древесного угля с начальным диаметром 8.5 мм и плотностью 525 кг/м<sup>3</sup>. Температура воздуха 293 К. Начальная температура частицы  $T_b = 700$  К, диаметр  $d_b = 8.5$  мм

близки: соответственно, при 293 К – 17.6 Вт/(м·К), а при 1100 К – 34.3 и 44.4 Вт/(м·К).

Таким образом, изменение средней по всему объему температуры пористой углеродной частицы определяется тепловыделением в результате протекания химических реакций  $q_{ch}$ , теплообменом частицы с газом  $q_g$  и стенками реакционной установки  $q_w$ , а также теплообменом через электроды термопары:

$$\frac{c_c \rho_c d}{6} \frac{\partial T}{\partial t} = q_{eff}, \quad T(t=0) = T_b, \quad (10)$$

$$q_{eff} = q_{ch} - q_g - q_w - q_t,$$

где  $c_c$  – удельная теплоемкость частицы;  $T_b$  – начальная температура частицы.

В результате имеем систему дифференциальных уравнений (1), (2), (6) и (10) для описания поведения коксовой частицы со слоем золы.

При расчетах использовались следующие параметры:  $E_1 = 75$  кДж/моль;  $Q_1 = 12.34 \cdot 10^3$  МДж/кгO<sub>2</sub>;  $k_{01} = 6.44 \cdot 10^3$  м/с;  $E_2 = 82.5$  кДж/моль;  $Q_2 = 6.86 \cdot 10^3$  МДж/кгO<sub>2</sub>;  $k_{02} = 9.11 \cdot 10^3$  м/с;  $F_{v0} = 5 \cdot 10^3$  м<sup>-1</sup>;  $\rho_{real} = 1600$  кг/м<sup>3</sup>;  $\rho_b = 530$  кг/м<sup>3</sup>,  $\chi_z = 0.5$ ,  $\rho_{g0} = 0.277$  кг/м<sup>3</sup>;  $\lambda_{g0} = 0.082$  Вт/(м·К),  $T_0 = 1273$  К;  $c_c = (17.15 + 4.2 \cdot 10^{-3} T - 8.79 \cdot 10^{-5} T^2) / 0.012$  Дж/(кг·К).

**Анализ результатов.** В воздухе комнатной температуры горение частиц древесного угля наступает после предварительного их нагрева выше 600-650К, т.е. после из зажигания [1]. Прочность золяного слоя достаточно слабая. Поэтому наблюдение горения частицы без золяного остатка осуществлялось периодическим резким сдуванием слоя с внешней поверхности частицы (рис.2, кривые 1). Температура частицы в процессе горения медленно повышается, что связано с уменьшением относительной роли теплоотдачи излучением. По мере

выгорания роль теплопотерь через концы термопары возрастает, что и приводит к плавному понижению температуры частицы перед ее самопроизвольным погасанием.

По мере нарастания зольного слоя рост температуры частицы (рис. 2, кривая 2) довольно быстро сменяется на медленное понижение. Анализ (10) показал, что в данном случае тепловым сопротивлением зольного слоя можно пренебречь. Однако слой золы заметно снижает суммарную скорость массопереноса кислорода к внешней поверхности углеродного остатка, что заметно понижает вблизи нее концентрацию кислорода, а, следовательно, и скорость химического тепловыделения.

**Выводы.** Таким образом, в результате рассмотрения задачи массообмена и теплообмена для частицы с нарастающим зольным слоем было объяснено особенности изменения во времени температуры и диаметра частицы древесного угля, которая загорается и горит в неподвижном воздухе комнатной температуры.

#### Литература:

1. *Черненко А.С.* Зажигание и горение частиц древесного угля в холодных азотно-кислородных смесях комнатной температуры. Часть I. Экспериментальные исследования. // *Физика аеродисперсних систем.* – 2014. – № 51. – С. 67-72.
2. Основы практической теории горения / под ред. *Померанцева В.В.* – Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. Отд-ние, 1986. – 312 с.
3. *Яровой Т.А., Вовчук Я.И., Золотко А.Н., Полетаев Н.И.* Воспламенение, горение и потухание частиц высокозольных углей. Часть II. Горение одиночной частицы высокозольного угля // *Физика аеродисперсних систем.* – 2001 – Т. 38. – С. 71-80.
4. *Калинчук В.В., Зинченко Ю.А., Черненко А.С., Куземко Р.Д.* Влияние диаметра и температуры пористых углеродных частиц на высокотемпературную кинетику образования оксида углерода и углекислого газа // *Физика аеродисперсних систем.* – 2013. – № 50. – С. 69-85.
5. *Высокотемпературное горение и газификация углерода / под ред. Е.С. Головиной.* – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 176 с.
6. *Черненко О. С., Калінчук В. В., Дараков Д.С., Конійка О.К.* Вплив підвісу на кінетику випаровування краплі рідкого палива // *Физика аеродисперсних систем.* – 2015. – № 52. – С. 47-62.

**Черненко О. С., Корчагіна М. М., Калінчак В. В.**

**Запалювання і горіння частинок деревного вугілля в азотно-кисневих сумішах кімнатної температури. Частина II. Аналітичне обґрунтування.**

*Проводиться теоретичне обґрунтування поведінки поруватої частинки деревного вугілля, яка горить в нерухомому повітрі кімнатної температури. Показано, що наявність зольного шару на поверхні частинки, що виникає в процесі горіння, приводить до якісних особливостей зміни температури і діаметру частинки.*

**Chernenko A.S., Korchagina M.N., Kalinchak V.V.**

**Ignition and combustion of charcoal particles in nitrogen-oxygen mixtures at room temperature. Part II Analytic justification.**

*A theoretical substantiation of a porous charcoal particle behavior, which burns in still air at room temperature, is carried out. It is shown that the presence of the ash layer on the particle's surface arising in the combustion process leads to qualitative features of the change in temperature and particle diameter.*

**Orlovskaya S. G., Liseanskaia M. V.**

*Odessa I.I. Mechnikov National University  
Ukraine, 65082, Odessa, Dvoryanskaya str.2,  
e-mail: [svetor25@gmail.com](mailto:svetor25@gmail.com)*

### **The oxide structures formation on the surface of tungsten**

*The temperature regimes and the kinetics of the formation of tungsten oxide crystals on the surface of a tungsten conductor heated by an electric current in air were studied, as well as the fractal dimension of branched oxide formations. It was shown that at the temperature higher than 1100 K, separate formations were observed on the surface of the conductor. These were nuclei of tungsten oxide crystals, which over time grew into branched formations. The fractal dimension of the structures obtained at different stages of growth was calculated using the principle of object coverage. It was determined that at the initial stage, the growth of crystals proceeds according to the mechanism of the Brownian motion "cluster-cluster", then along the Brownian motion "particle-cluster".*

The use of tungsten oxides in the chemical industry as catalysts (dehydration of alcohols, cracking of hydrocarbons) determines the relevance of studies of temperature regimes and patterns of their formation. Branched nano- and microcrystalline oxides, in addition to catalytic properties, have unique qualities and high reactivity.

The aim of this work is to study the temperature regimes and kinetics of the formation of tungsten oxide crystals on the surface of a tungsten conductor heated by an electric current in the air, and to study the fractal dimension of branched oxide formations.

To study high-temperature oxidation, an experimental stand was used [1], the scheme of which is shown in Fig. 1. The study was carried out by the "hot filament" method on tungsten conductors of the IA brand which have a diameter  $d = 200 \mu\text{m}$  and a length  $L = 10.2 \text{ cm}$ . Conductors were heated by an electric current in the air.

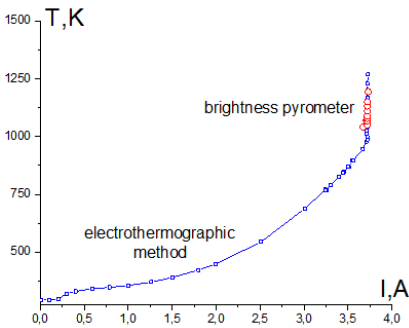
The stationary temperature regime was set by changing the amperage, which was gradually increased at an interval of 2 minutes. The temperature of the tungsten filament during the oxidation was determined by the electrothermographic method, and at the stage of the conductor glowing (at high heating currents), the temperature was simultaneously measured with a brightness pyrometer (EOP type) at a fixed point of the sample. The optical prefix made it possible to determine the appearance of oxide crystalline formations on the surface. After it, with a fixed current strength, the growth of individual oxide crystals on the surface of the conductor was observed.

The temperature of an electrically heated metal conductor is determined by the dependence of the specific resistivity on temperature.

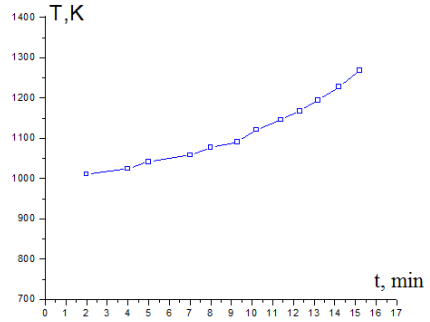
$$\rho = \rho_0 [1 + \gamma(T - T_0)]. \quad (1)$$

Here  $\rho_0$  – specific resistance at temperature  $T_0 = 273 \text{ K}$ ,  $\Omega \cdot \text{m}$ ;  $\gamma$  – temperature coefficient of resistance,  $\text{K}^{-1}$ .

For the conductor temperature at any time, we have:



**Fig. 2.** Tungsten conductor temperature dependence of the current strength



**Fig. 3.** Temperature regime of growth of tungsten oxide crystals

$$T = \left( \frac{R}{R_k} - 1 \right) \left( \frac{1}{\gamma} - T_0 \right) + \frac{R}{R_k} T_k. \quad (2)$$

Where  $T_k$  – ambient temperature, K,  $R_k$  – resistance at temperature  $T_k$ ,  $\Omega$ .

The accuracy in determining the temperature by the electrothermographic method is: for a low-temperature range of values of 2%, and for a high-temperature range it does not exceed 5%.

In the high-temperature range, when the conductor glowed, the non-contact method of brightness pyrometer was used to measure the temperature.

The brightness temperature  $T_b$  of a non-black body with a monochromatic coefficient of radiation  $\epsilon_{\lambda T}$  having a true temperature  $T$  is numerically equal to the temperature of the black body at which the monochromatic brightness  $E_{\lambda T_b}^0$  of the black body is equal to the monochromatic brightness  $E_{\lambda T}^i$  of this non-black body

$$\begin{aligned} E_{\lambda T_b}^0 &= E_{\lambda T}^i \\ e^{-\frac{C_2}{\lambda T_b}} &= \epsilon_{\lambda T} e^{-\frac{C_2}{\lambda T}}, \end{aligned} \quad (3)$$

from which, after logarithm and transformations, we finally obtain the relationship between  $T_b$  and  $T$

$$T = \left( \frac{1}{T_b} - \frac{\lambda}{C_2} \ln \epsilon_{\lambda T} \right)^{-1}. \quad (4)$$

It follows from equation (4) that the brightness temperature  $T_b$  is always lower than the real temperature. For small values  $\epsilon_{\lambda T}$  and high temperatures, the difference  $T - T_b$  can reach several hundred degrees.

Fig. 2 shows the experimental dependence of the conductor temperature on the heating current in stationary states.

The analysis of the  $T(I)$  dependence shows that, the stationary states of the conductor until reaching the temperature of 700K were determined by the equality of the

Joule heat release and the convective heat flow to the surrounding gas and to the terminals in which the conductor was fixed. At temperatures above this point, oxidation begins from releasing heat and forming an oxide layer on the conductor surface. At temperatures exceeding 1000 K, a glow of the wire appears, radiation heat loss increases. The release of heat due to the chemical oxidation reaction leads to increase of the temperature and the thickness of the oxide layer of the sample surface. The vertical section of the curve corresponds to the temperature regimes of the crystals appearance and growth [2].

Fig. 3 it shows the time-extended temperature regime of crystal growth on the surface of the primary oxide film. During this period, the temperature of the conductor increased by almost 300K in 15 minutes. This is a consequence of the chemical reactions flow on the conductor surface that lead to thickening of the basic oxide layer.

Having studied under the microscope the conductor at various stages of oxidation, it was established, that with a gradual increase in temperature, at first a continuous oxide layer is formed on the surface of the tungsten, then, due to various mechanical stresses in the metal and oxide film, it cracks, causing longitudinal grooves and ditches. At temperatures above 1000 K, individual filamentary crystals begin to appear on the oxide layer surface, which subsequently transform into branched oxide structures.

The axial growth rate of whiskers is described by the equation [3]:

$$\frac{dL}{dt} = I + \frac{4I\lambda_s}{d} \operatorname{th}\left(\frac{L}{\lambda_s}\right), \quad (5)$$

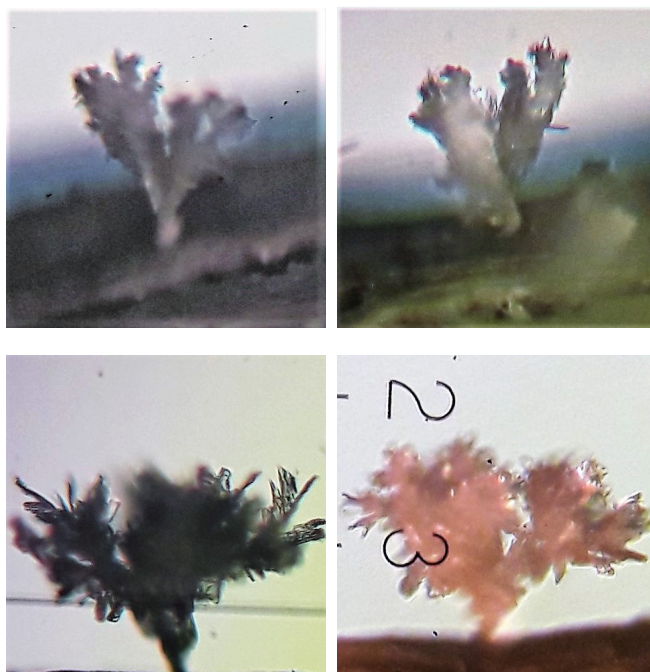
$$I = \frac{m}{\rho}(A - A_0).$$

Where  $\lambda_s$  – average length of the diffusion path of an atom before re-evaporation,  $m$  – is the mass of an atom,  $\rho$  – density of a substance,  $A$ ,  $A_0$  – the number of collisions of particles with a surface in a gas and a saturated vapor, respectively.

This formula consists of two terms: the first part describes the axial growth rate, due to the direct condensation of steam on top, the second - the other part, due to the deposition of particles on the side faces, followed by diffusion to the top. The second term depends on the diameter of the whisker crystal, as well as on time (through  $L$ ). With increasing the oxidation time, oxide structures amount on the surface and the geometric dimensions raise.

Fig. 4 shows various samples of tungsten oxide crystals. They are formed on the shores of cracks in the oxide film, each of them have a thin base foot, and can reach 200  $\mu\text{m}$ . Depending on the temperature and the holding time in a non-aggressive non-stationary mode, two forms of crystals can be distinguished. The first one is in the form of two-petals - which obtained by heating the conductor to 1470 K in 10 minutes. Strongly branched structures - bushes - are formed in 15-20 minutes at the temperature 2100K.





**Fig. 4** Tungsten oxide crystals on the conductor surface

In order to determine the mechanisms of crystal growth at different stages, their fractal dimension ( $D$ ) was calculated. There are a lot of approaches to the estimation of fractal dimension [4], the most commonly used method is cell cover. At the moment there are several works devoted to correlating the fractal dimension and cluster formation mechanism. Fractal clusters, or fractal aggregates, it is customary to call structures that are formed when solid aerosols are combined in a gas in the case of diffusional character of their motion. The fractal cluster has a characteristic branched structure. As a result of using the works of Smirnov [5], it was determined that the fractal dimension  $D = 1.4$  corresponds to the Brownian motion and the formation of the structure by the cluster-cluster principle, and  $D = 1.6$  is the Brownian motion of the particle-cluster.

Conclusions: The temperature regime and the kinetics of the appearance and growth of tungsten oxide crystals on the main oxide film surface are determined. It is shown that the formation of crystals does not occur at temperatures below 1000K. It is established, that in the process of quasistationary oxidation plate or bush-like oxide structures are formed, which is due to the temperature regime of tungsten oxidation. It is obtained that at the beginning stage the growth of crystals occurs according to the principle of Brownian cluster-cluster motion, and the growth into branched structures - according to the mechanism of Brownian particle-cluster motion.

### References:

1. *Shkoropado M.S., Orlovska S.G., Shevchenko Yu.A.* Study of kinetics and mechanism the growth of crystal structures on the surface of tungsten conductors // Poroshkova metallurgiya. – 2016 – № 11/12 – P. 129 – 136.
2. *Orlovskaya S.G., Shkoropado M.S., Shevchenko U.A., Odnostalko A.O.* Research of High – Temperature Heat and Mass Transfer and Oxidation of Samples of Refractory Metals in the Air // Physics And Chemistry Of Solid State. – 2014 – V. 15, №2. – P. 384 – 387.
3. *Simmons J.A., Parker R., Howard R.E.,* // J. Appl. Phys. – 1964 – № 35 – P. 2271.
4. *Kurdyukov V.I., Ostapchuk A.K., Ovsyannikov V.Ye., Rogov E.Yu.* Analysis of methods for determining fractal dimension // Vestnik KuzGTU – 2008 – №5 . – P.46 – 49.
5. *Smirnov, B.M.* Fractal clusters// UFN. – 1986 – № 149. – P. 177 – 219.

### **Орловская С.Г., Лисянская М.В.**

#### **Образование оксидных структур на поверхности вольфрама.**

*В работе изучаются температурные режимы и кинетика образования кристаллов оксида вольфрама на поверхности вольфрамового проводника, нагреваемого электрическим током в воздухе, а также проводятся исследования фрактальной размерности разветвленных оксидных образований. Показано, что при температуре больше 1100K на поверхности проводника наблюдалось появление отдельных образований – зародышей кристаллов оксида вольфрама, которые с течением времени разрастались в ветвистые образования. Проведен расчет фрактальной размерности полученных структур на различных этапах роста по принципу покрытия объекта. Определено, что на начальном этапе рост кристаллов идет по механизму броуновского движения «кластер-кластер», затем по механизму «частица-кластер».*

### **Орловська С.Г., Лисянська М.В.**

#### **Утворення оксидних структур на поверхні вольфраму.**

*В роботі вивчаються температурні режими і кінетика утворення кристалів оксиду вольфраму на поверхні вольфрамового дротика, що нагрівається електричним струмом в повітрі, а також дослідження фрактальної розмірності розгалужених оксидних утворень. Показано, що при температурі більше 1100K на поверхні провідника спостерігалася поява окремих утворень - зародків кристалів оксиду вольфраму, які з плином часу розрасталися в гіллясті структури. Проведено розрахунок фрактальної розмірності отриманих структур на різних етапах росту за принципом покриття об'єкта. Визначено, що на початковому етапі зростання кристалів йде за механізмом броунівського руху «кластер-кластер», потім за механізмом «частинка-кластер».*

## ФІЗИКА ГОРИННЯ

УДК 536.46

**Стариков М. А., Хлебникова М. Е., Буланин Ф. К., Сидоров А. Е.,  
Поletaев Н. И. Шевчук В. Г.**

*Институт горения и нетрадиционных технологий, Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, Одесса, ул. Дворянская 2, 65082, Украина,  
E-mail: incomb@ukr.net*

### **Горение диспергированного жидкого и твердого топлива в присутствии электрических разрядов**

*В работе приведены предварительные результаты экспериментальных исследований двухфазного пламени диспергированного в воздухе жидкого и твердого органического горючего, а также пылевого пламени частиц металлов в присутствии высоковольтных, высокочастотных электрических разрядов. Исследовано влияние стримерных разрядов в газе на интенсификацию горения и условия стабилизации газодисперсных систем. Обсуждаются основные физико-химические механизмы влияния ионизации двухфазной среды на кинетику гомогенных и гетерогенных реакций, процессы массо-теплопереноса в условиях неравновесной пылевой плазмы при сжигании одиночных частиц и их газозвесей.*

**Введение.** Актуальным направлением исследований в теплоэнергетике является изучение энергетических и технологических аспектов горения диспергированных в окисляющем или инертном газе частиц твердого или жидкого горючего. Этот способ сжигания топлива привлекает большой скоростью горения газозвесей частиц, обусловленной высокой интенсивностью процессов тепло-массобмена за счет большой удельной поверхности газозвеси. Однако, в случае низкокалорийных горючих – высокозольные угли, сланцы, измельченные органические отходы (древесина, гуано) горение их газозвесей затруднено, а иногда практически не может быть реализовано из-за очень низких скоростей горения и требует применения новых подходов. Результатом многолетних исследований, выполненных во всем мире, стало понимание необходимости привлечения для решения задач горения газозвесей, как в энергетике и в экологии, так и для технологических приложений горения, знаний из физики газовой и пылевой плазмы.

Применение плазмы для улучшения горения топлива имеет длинную историю и в последние два десятилетия активно развивается, выделившись в актуальное научно-техническое направление (Plasma Assisted Combustion - PAC). На сегодняшний день большинство результатов по влиянию плазмы на процессы преобразования топлива получены для газового пламени [1].

Для газовых пламен основные механизмы интенсификации горения топлив с использованием различных видов плазмы известны достаточно хорошо. Это,

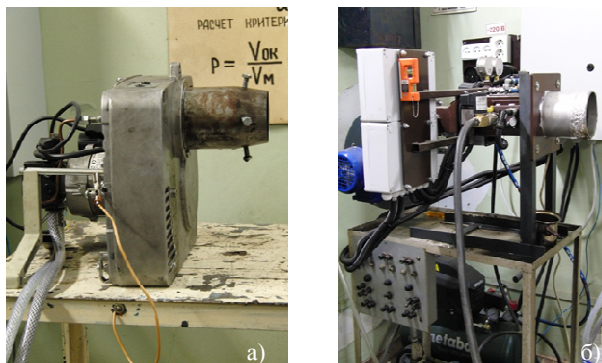
прежде всего, *тепловые, кинетические и транспортные* механизмы. Значительно меньше изучено влияние плазмы на процессы воспламенения и горения диспергированного в окисляющем газе горючего. Наличие дисперсной фазы в пламени приводит к появлению новых по сравнению с газами эффектов, обусловленных наличием заряда у частиц твердого и жидкого горючего. Большой интерес представляют необычные механизмы переноса массы и тепла за счет электрического взаимодействия электрически заряженных частиц топлива и ионов газа или поляризационного взаимодействия заряженных частиц с электро-нейтральными полярными молекулами газа [9].

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование влияние плазмы на горение диспергированного топлива и анализ ключевых, по мнению авторов, эффектов, возникающих в условиях термической или газоразрядной ионизации двухфазного пламени. Эти эффекты влияют на все основные процессы преобразования дисперсного топлива в пылевом пламени и поэтому могут быть использованы для разработки новых энергетических и технологических схем сжигания твердого и жидкого топлива.

**Экспериментальные исследования двухфазных пламен твердого и жидкого топлива.** Для исследования влияния неравновесной ионизации двухфазного пламени жидкого топлива на их горение в настоящей работе использовались серийные жидкотопливные горелки для отопительных котлов - горелка Ламборджини и горелка МГС-Д-25-4, которые могут работать на дизельном топливе, нефти или мазуте (рис.1).

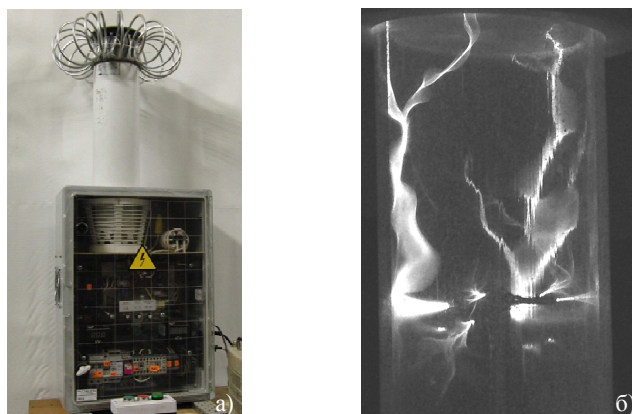
Для ионизации пламени в наших исследованиях применялся генератор Тесла со следующими характеристиками: частота генерации стримеров  $f \sim (0.1 \div 0.3)$  МГц, амплитуда импульсов  $U \leq 300$  кВ. Внешний вид генератора и стримеров в реакторе приведены на рис.2. Жидкотопливные горелки и генератор Тесла были предоставлены фирмой ООО «САНКАПИТАЛИНТЕЛЕКТ-ЭНЕРЖИ».

Пылевые пламена дисперсного горючего изучались на «пылевой» горелке, разработанной в ИГНТ ОНУ. Лабораторный стенд включал в себя коаксиаль-

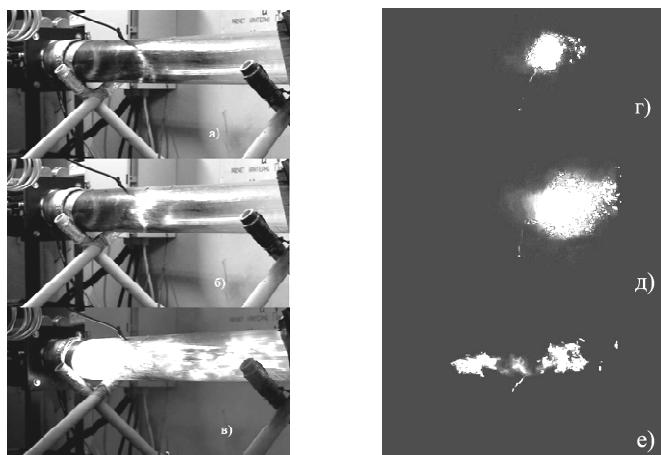


**Рис. 1.** Внешний вид жидкотопливных горелок:

а) - горелка Lamborghini ECO-5RN; б) горелка МГС-Д-25-4



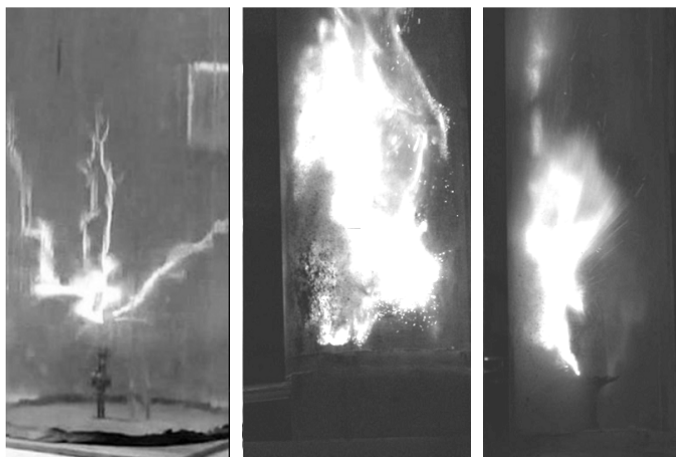
**Рис. 2.** Генератор высоковольтных стримерных разрядов (а) и разряд в трубе (б)



**Рис. 3.** Факел дизельного топлива на пределе воспламенения электрическим разрядом в кварцевой защитной трубе (а-в) и без трубы (г-е). Концентрация горячего на рисунках увеличивается сверху вниз

ную «пылевую» горелку, блок подачи и распыла порошка, систему улавливания продуктов сгорания, контрольно-измерительную аппаратуру [2]. Исследования проводились для ламинарных диффузионных двухфазных факелов (ЛДДФ) Al, Fe, Zn, Zr. Подробно способ создания ЛДДФ, а также некоторые его свойства рассмотрены в работах [2].

**Жидкое горючее.** На рис. 3(а-в) приведены фотографии распыленного воздухом в защитной кварцевой трубе дизельного топлива для условий, при ко-



**Рис. 4.** Фотографии пылевого пламя частиц твердого топлива в среде стримерного разряда. а) Высокочастотный разряд в воздухе; б) пламя частиц торфа ( $d_{10} < 100$  мкм); в) угольная пыль ( $d_{10} < 100$  мкм)

торых жидкотопливная горелка не поддерживает горение смеси горючего с воздухом. Фотографии на рис. 3 (г-е) получены с помощью скоростной киносъемки для тех же условий, но для улучшения видимости кварцевая труба не использовалась. Электроды генератора высокочастотных импульсов располагались на расстоянии 20-30 см от форсунки горелки. При включении электрического разряда наблюдались небольшие очаги пламени, которые сносились потоком газа (рис. 3а и 3г). При повышении концентрации горючего в смеси картина качественно не изменялась, но область, в которой наблюдалось воспламенение отдельных объемов смеси, увеличивалась (рис. 3б и 3д). При дальнейшем повышении концентрации горючего скоростная фотосъемка позволила зафиксировать распространения пламени влево и вправо от электрода с разрядом. Наблюдалась надежная стабилизация пламени горелки (см. рис. 3в и 3е), которая исчезала при отключении электрического разряда.

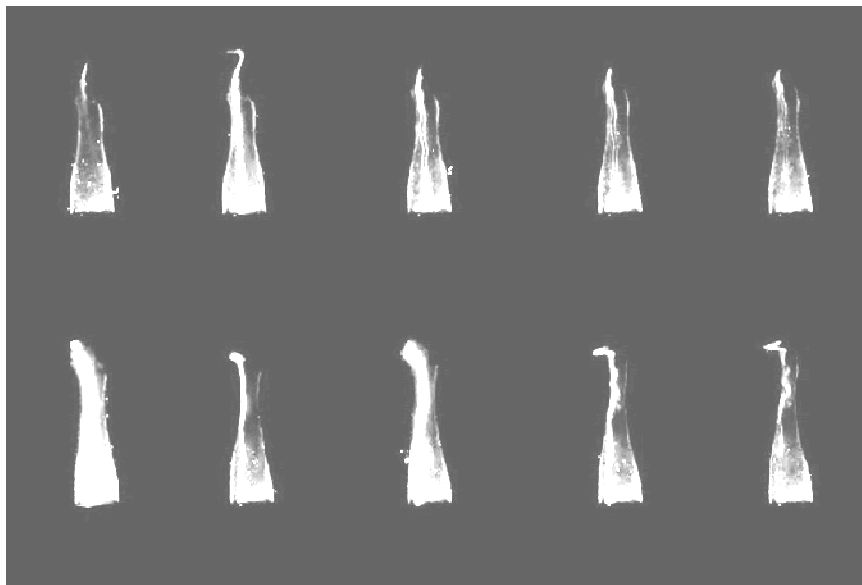
**Твердые частицы органического горючего.** Были проведены пилотные эксперименты, направленные на улучшение стабилизации пламени и увеличение интенсивности горения органической пыли (уголь, торф) под действием стримерного разряда, полученного с помощью генератора Тесла. Эксперименты проводились для твердых горючих в условиях, детально описанных в работе [3]. На рис. 4 приведены фотографии электрического разряда в трубе горелки (рис. 4а) и внешний вид факелов частиц торфа (рис. 4б) и частиц угля (рис. 4в). Наблюдалось существенное улучшение стабилизации пламени частиц торфа и угля, увеличение скорости горения и полноты сгорания, но следует отметить значительную нестабильность двухфазного факела, которая выражалась в коле-

баниях светимости пылевого пламя и его фрагментации на отдельные ячейки размером около 1-2 см.

Пока немногочисленные экспериментальные исследования горения газодисперсных систем в плазме показывают эффективность этого подхода к преобразованию дисперсного топлива в энергетике, например, для интенсификации горения угля и стабилизации пламени в промышленных топках в [4] с помощью плазмотрона.

Весьма перспективным может оказаться сжигание частиц твердого горючего в атмосфере водяного пара. Например, в [5-6] с целью получения водорода исследовано горение газозвеси частиц алюминия в водяном паре. Для ионизации газозвеси частиц алюминия в водяном паре и генерации радикалов (молекулы OH) в [5] использовался высокочастотный генератор с катушкой Тесла ( $U \sim 30$  кВ,  $f \sim 0.5$  МГц). Для плоских частиц алюминия с размерами 50x200 мкм отмечается значительное (от нескольких часов в отсутствие плазмы до примерно 1 с при наличии плазмы) уменьшение времени химической реакции алюминия с водой. Экспериментально показана возможность детонации газозвеси частиц алюминия в водяном паре при наличии плазмы. Эти исследования получили развитие в [6] с частицами алюминия диаметром до 100 мкм. Для ионизации газозвеси частиц металла в аргоне и водяном паре при атмосферном давлении применялись различные разряды в газе – дуга постоянного тока, высокочастотный генератор на основе катушки Тесла ( $f \sim 0.5$  МГц), генератор микросекундных импульсов, а также их комбинации. Авторы утверждают, что внутри лабораторного плазмохимического реактора скорость реакции алюминия водяным паром в неравновесной плазме на 2 – 3 порядка превышала скорость реакции без плазмы. Приведены оценки энергии необходимой для генерации одной молекулы водорода (1-3 эВ/молекулу), что практически на два порядка меньше энергии необходимой для получения молекулы водорода с помощью электролиза.

**Ламинарный пылевой факел частиц металла.** Экспериментально проверена возможность использования стримерного разряда для воздействия на процессы горения и фазообразования конденсированных продуктов сгорания в ламинарных пылевых пламенах металлов. Такие исследования представляют интерес для развития технологических приложений горения металлов [2]. Частицы всех металлов имели приблизительно одинаковый размер  $d_{10} \approx 5$  мкм. По мнению авторов, можно ожидать разные эффекты влияния плазмы на горение металлов. Для факела частиц цинка ожидалось существенное улучшение его стабилизации. Ранее нами было показано, что факел цинковых частиц не удается стабилизировать при комнатной температуре даже в чистом кислороде [2]. Для факелов частиц железа, титана, циркония представляет интерес изменить с помощью плазмы режим гетерогенного горения частиц металла на газофазный режим, что позволит усовершенствовать синтез наночастиц оксидов этих металлов методом газодисперсного синтеза. Для пылевого факела частиц алюминия и магния управляемая ионизация зоны горения позволит разработать методы управления размером наночастиц оксида алюминия.



**Рис. 5.** Кинограмма пылевого факела частиц алюминия в стримерном разряде

После стабилизации диффузионного пылевого факела металлических частиц и включения генератора Тесла между металлическим корпусом «пылевой» горелки и металлическим электродом, расположенным вертикально вдоль геометрической оси цилиндрической горелки, возникал электрический разряд. Диаметр внутренней трубки горелки был равен 0.24 м. Конец электрода размещался на расстоянии 0.10 - 0.12 м от среза горелки.

Для иллюстрации на рис. 5 приведена кинограмма факела частиц железа в разряде. В отличие от рассмотренных выше турбулентных пламен органического твердого и жидкого горючих, зона горения ламинарного пламени частиц металла имеет вид конуса, и области высоких температур локализованы внутри узкой конической зоны горения. Ожидалось, что электрический разряд распределится по поверхности горения (поверхности с максимальной температурой), но в экспериментах возникал только один канал электрического разряда толщиной несколько миллиметров (рис.5). Канал размещался вдоль образующей конуса поверхности пламени и скорее всего в результате конвективных колебаний поверхности пламени положения канала случайно изменялось.

Наши ожидания были подтверждены только частично. В экспериментах значительная интенсификация горения металлической пыли наблюдалась только в области канала электрического разряда. Для частиц цинка наблюдалось их горение в электрическом разряде, о чем свидетельствует высокая светимость зоны горения, характерный для пламени цинка бирюзовый цвет, и наличие в продуктах сгорания частиц оксида цинка. В продуктах сгорания железа появи-



лись частицы оксида железа коричневого цвета ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), что свидетельствует об изменении фазового состава (и размера частиц) продуктов сгорания. В обычных условиях в диффузионном факеле частиц железа образуются частицы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , размер которых близок к размеру частиц исходного горючего [2].

Исходя из изложенного, можно утверждать, что для улучшения горения пылевых пламен органического и неорганического горючего нужно применять те виды газовых разрядов, которые приводят к образованию объемной ионизации зоны горения двухфазного пламени.

**Механизмы ионизации газовой и дисперсной фазы в пылевом пламени твердого горючего.** Для интенсификации горения газов применяются несколько видов разрядов в газе при атмосферном давлении, которые образуют плазму с разными свойствами. *Холодная* плазма образуется в результате ударной ионизации быстрыми электронами в коронных разрядах, стримерах, искровых разрядах, разрядах через диэлектрический барьер и является сильно неравновесной. *Термическая* плазма образуется в электрической дуге постоянного или переменного тока и приводит к сильному разогреву среды в разрядном канале, что существенно снижает энергию электронов, необходимую для ионизации пламени (по сравнению с холодной плазмой). В такой плазме температура электронов близка к температуре газа и плазма по газовой фазе близка к равновесию. Различают также промежуточный вид плазмы, между холодной и термической - «теплую» плазму («warm» plasma). «Теплая» плазма является неравновесной (температура электронов  $T_e = 1-3 \text{ eV} \gg T_g \sim 2000 \text{ K}$ ) и может быть получена практически с помощью любого газового разряда (микроволновой разряд, тлеющий разряд, скользящий дуговой разряд, искровой разряд и др.) при условии, что мощность разряда (или разрядный ток) стабилизирована, чтобы не позволить разряду перейти в область дугового разряда (термической плазмы). По мнению авторов [7], этот тип разряда является оптимальным для большинства применений плазмы для преобразования топлива.

Присутствие частиц конденсированной фазы в газе сильно усложняет описание таких систем. Если речь идет о термической ионизации среды, то зарядка микродисперсных частиц проходит по диффузионному механизму, причем заряд частиц ничем не ограничен и пропорционален диаметру частицы. Если в двухфазной среде приложено электростатическое поле, то зарядка частицы происходит в направленном потоке электронов или ионов и при данной напряженности электрического поля и при данном размере частиц существует максимально возможный заряд частицы  $Q_m = \frac{E_s d^2}{4}$  [8]. Заряд достигает предельного значения, при котором напряженность внешнего поля становится равной поверхностной напряженности  $E_s$ , необходимой для спонтанной эмиссии электронов или ионов с поверхности капли. В реальных условиях наиболее вероятной является зарядка частиц в результате совместного действия диффузионной зарядки и зарядки в электростатическом поле [8].

В газоразрядной плазме в области параметров конденсированной и газовой фаз, при которых выполняется условие  $r_k \ll \lambda_D \ll l_g$  ( $\lambda_D$  – дебаевский радиус экранирования по электронной и ионной компонентам,  $l_g$  – длина свободного пробега молекул газа), заряд частиц радиусом  $r_k$  можно определить в приближения ограниченного орбитального движения (OML) [8]. Если плазму в зоне горения можно считать равновесной (все компоненты плазмы имеют одинаковую температуру) и конденсированную компоненту можно рассматриваться как плазменную компоненту (выполняется условие: количество частиц  $N_{\lambda_D} = \frac{4}{3}\pi\lambda_D n_k$  в дебаевской сфере много больше единицы, где  $n_k$  – концентрация частиц), ионизационное равновесие в системе можно рассчитать с помощью системы уравнений Саха.

**Влияние ионизации среды на кинетику химических реакций и процессы переноса.** В ионизированных газодисперсных системах скорость протекания гетерогенных химических реакций может зависеть от наличия электрического заряда у частицы. Этот эффект объясняется увеличением интенсивности взаимодействия молекул газа с поверхностью частицы в результате увеличения кинетической энергии заряженных или электрически нейтральных полярных молекул газа в электрическом поле заряда на длине свободного пробега молекул газа  $l_g$ . Увеличение энергии молекул газа приводит к тому, что увеличивается доля молекул обладающих энергией достаточной для преодоления потенциального барьера химической реакции. В таких условиях возникают мощные электростатические молекулярные насосы, влияющие на процессы переноса активных реагентов к зоне реакции и при постоянной температуре среды увеличение скорости химической реакции на поверхности топлива можно трактовать, как «понижение» энергии активации реакции ( $E_a$ ).

Увеличение кинетической энергии полярной молекулы ( $\varepsilon_T$ ) равно изменению электростатической энергии диполя  $u(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{pQ}{r^2}$  в электрическом поле частицы на длине свободного пробега молекулы  $l_g$  ( $p$  – дипольный момент молекулы,  $Q$  – заряд частицы конденсированной фазы,  $r$  – расстояние от центра частицы до диполя,  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная). Для радиуса частицы  $r_k \ll l_g$  получим:

$$\varepsilon_T = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{pQ}{(l_g + r_k)^2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{pQ}{r_k^2} \approx \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{pQ}{r_k^2}. \quad (1)$$

Очевидно, что если частица взаимодействует не с полярной молекулой, а с ионом противоположного с зарядом  $q$  знака, то изменение кинетической энергии иона будет  $\varepsilon_T \sim qQ/r_k^2$ .

Если  $\varepsilon_a = E_a/N_A$  – энергия активации химической реакции, приходящаяся на одну молекулу ( $N_A$  – число Авогадро), то только молекулы, обладающие кинетической энергией  $\varepsilon \geq \varepsilon_a$ , вступят в химическую реакцию на поверхности

частицы. Количество таких активных молекул ( $\Delta N$ ) из общего их количества  $N$  можно оценить из распределения Максвелла:

$$\Delta N = \frac{2N}{\sqrt{\pi}(k_B T_g)^{3/2}} \int_{\varepsilon_a}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon/k_B T_g} d\varepsilon = \frac{2N}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \sqrt{z} e^{-z} dz, \quad (2)$$

где  $z = \varepsilon_a/k_B T_g$ . Учтеть кинетическую энергию молекулы, приобретенную в электрическом поле частицы конденсированной фазы, можно заменив нижний предел интегрирования в (2) на  $z = \varepsilon_a/(k_B T_g + \varepsilon_T)$ .

Для иллюстрации величины этого эффекта рассмотрим окисление в водяном паре (дипольный момент молекулы воды  $p = 0.6 \cdot 10^{-29}$  К м) частицы алюминия радиусом  $r_k=1$  нм с минимальным зарядом  $Q = 1.6 \cdot 10^{-19}$  К при температуре  $T_m \sim 933$  К (температура плавления алюминия). С помощью (1) и (2) легко убедиться, что электростатическое взаимодействие частицы металла и молекулы воды приводит к 4-х кратному увеличению количества молекул, преодолевающих активационный барьер реакции, чем в случае, когда это взаимодействие не учитывается (в оценках принималось  $E_a = 200$  кДж/моль). Это эквивалентно «понижению» энергии активации реакции в  $(1 + \varepsilon_T/k_B T_g) \approx 1.7$  раз.

В [10] для наночастиц железа и алюминия, окисляющихся во влажном воздухе, показано, что электростатические молекулярные насосы могут приводить к весьма неожиданным эффектам, когда основным окислителем горючего оказывается не кислород воздуха, а пары воды, мольная доля которых на порядок меньше концентрации кислорода.

В [11] было показано, что ионизация среды оказывает сильное влияние на кинетику тройных химических реакций  $A + B + C \rightarrow AB + C$ , которые весьма распространены в процессах горения. Если не учитывать обратную реакцию, то

скорость такой реакции  $\frac{d[AB]}{dt} = K[A][B][C]$ , где  $C$  – молекула балластного газа.

Для электронейтральных молекул порядок константы скорости реакции  $K \sim 10^{45}$  м<sup>6</sup>/с [12]. Наличие в газовой фазе молекулярных ионов может существенно повлиять на константу тройных столкновений. Если молекула является полярной, то константы тройных столкновений увеличивается на два порядка:  $K \sim 10^{43}$  м<sup>6</sup>/с [11]. Максимальное значение будет иметь константа скорости реакции разноименно заряженных частиц. В случае кулоновского взаимодействия однократно заряженных ионов противоположного знака  $K \sim 10^{41}$  м<sup>6</sup>/с.

Другим кинетическим аспектом взаимодействия заряженных частиц конденсированной фазы с нейтральными полярными молекулами или ионами является зависимость эффективного сечения столкновения молекул и частицы  $s_p = \pi b^2$  от величины электростатического потенциала диполя (или иона) в поле частицы. Для полярной молекулы эффективный радиус сечения столкновения  $b$  можно оценить из условия равенства тепловой энергии молекулы потенциалу диполя

$\frac{3k_B T_g}{2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{pQ}{b^2}$ , откуда  $b = \sqrt{\frac{pQ}{6\pi\varepsilon_0 k_B T_g}}$ . В области размеров частиц

меньше 1-2 нм эффективное сечение столкновения может многократно превышать геометрическое сечение частицы, поэтому частота столкновения молекул газа с поверхностью частицы  $f = \frac{1}{4} n v_T s_p$  ( $n$  – концентрация молекул,  $v_T$  – скорость теплового движения молекул), которая определяет предэкспонент в законе Аррениуса, может быть значительно больше, чем в отсутствие электростатического взаимодействия.

Отметим, что интенсивность теплообмена частиц в свободно молекулярном режиме также определяется через частоту столкновений и коэффициент тепловой аккумуляции энергии, поэтому взаимодействие заряженной частицы (кластера) с полярной молекулой должно приводить к улучшению теплообмена мелких частиц с окружающей средой. Такой механизм важен для сброса теплоты горения или конденсации мелкими частицами конденсированной фазы.

Если для частиц выполняется условие  $r_k \gg l_g$ , то из уравнения (1) следует  $\epsilon_r \rightarrow 0$  и молекулярные электростатические насосы перестают работать. Как и в нейтральных газовзвесах, тепло- массообмен частиц с газом определяется диффузионно-кинетическим фактором  $k\beta / (k + \beta)$ . Причем как на скорость химической реакции ( $k$ ), так и на скорость массообмена ( $\beta$ ), в большей или меньшей мере будет оказывать влияние ионизация пламени (быстрые реакции с радикалами и ионами, кулоновское взаимодействие реагентов, амбиполярная диффузия реагентов и т. п.).

Еще одним важным механизмом влияния ионизации пламени на характеристики горения диспергированного топлива является дробление капель жидкого горючего в результате накопления на ее поверхности электрического заряда, достигающего предел Релея  $Q_r = \sqrt{2\pi\sigma d^3}$ , где  $\sigma$  – поверхностное натяжение жидкости [8]. Капля делится на несколько более мелких устойчивых капель. Заряд образовавшихся капель в электрическом поле возрастает в направлении  $Q_m$ , но достигнув релеевского предела  $Q_r$ , капли снова делятся на несколько более мелких капель. Этот лавинообразный процесс деления в электрическом поле прекращается, когда размер горящих (или испаряющихся) капель становится таким, что предельный заряд капли достигается раньше, чем предел устойчивости Релея ( $Q_m < Q_r$ ). Этот минимальный размер капель  $d_m$

можно оценить из соотношения  $Q_r = Q_m$ , откуда  $d_m = \frac{16\pi\sigma}{E_s^2}$ . Следует иметь в виду, что при приближении температуры капли горючего к температуре кипения жидкости, поверхностное натяжение уменьшается ( $\sigma \rightarrow 0$ ) и, соответственно  $d_m$

стремится к нулю. Таким образом, рассмотренный механизм лавинообразного деления капель распыленного жидкого горючего может существенно улучшать характеристики горения жидких углеводородных топлив и водотопливных эмульсий на их основе.

**Заключение.** Из приведенного в работе рассмотрения следует вывод о перспективности технологии плазменно-стимулированного горения для эффек-

тивного сжигания диспергированного горючего. Можно ожидать, что высокая химическая активность среды, которая достигается за счет активных радикалов и атомов, возбужденных молекул кислорода и озона, улучшение в плазме транспортных механизмов переноса массы и тепла, существенно повлияет на режим и скорость горения частиц горючего и тем самым позволит решить актуальные задачи преобразования топлива в энергетических и технологических приложениях горения дисперсного топлива.

Очевидно, что внедрение этой технологии в промышленную энергетику требует накопления новых, прежде всего экспериментальных, данных и знаний о плазменно-стимулированном горении дисперсных систем в электрических разрядах различного вида. Для этого необходимо совершенствование известных и развитие новых методик определения основных характеристик неравновесной пылевой плазмы в зоне горения пламени диспергированных жидкого и твердого горючих и разработки методов получения и диагностики таких пламен при наличии высоковольтных разрядов в газе.

Для эффективного внедрения плазменно-стимулированного горения дисперсных систем в промышленные энергетические схемы требуется тщательный теоретический анализ влияния ионизации пламени на кинетику гетерогенных и газофазных реакций, влияния электрических зарядов газа и конденсированной фазы на процессы тепло-массопереноса. Поэтому, потребуется разработка новых физических моделей, алгоритмов и программ для адекватного описания таких процессов.

#### Литература:

1. *Yiguang Ju, Wenting Sun.* Plasma assisted combustion: Dynamics and chemistry// *Progress in Energy and Combustion Science* – 2015. – Vol. 48. – P. 21-83.
2. *Золотко А.Н., Полетаев Н. И., Вовчук Я. И.* Газодисперсный синтез наночастиц оксидов металлов. // *Физика горения и взрыва.* – 2015.– Т. 51, №2. – С. 125-143.
3. *Кондратьев Е.Н., Шевчук В.Г., Стариков М.А. и др.* Поведение дисперсных систем в атмосфере стримерного разряда // *Материалы XXIV конференции стран СНГ «Дисперсные системы».* – Одеса, 2010. – С. 153-154.
4. *Gorokhovski M.A., Jankoski Z., Lockwood F.C., Karpenko E.I.* Messerle V.E.,Ustimenko A.B. Enhancement of Pulverized Coal Combustion by Plasma Technology // *Combustion Science and Technology* – 2007. – Vol.179, №.10. – P.2065–2090.
5. *Klimov A., Bityurin V., Grigorenko A., Kutlaliev V., Moralev I., Tolkunov B.* Plasma Assisted Combustion of Heterogeneous Fuel in High-Speed Airflow // *AIAA Paper AIAA-2009-1411- 250.* – P.11
6. *Klimov A., Bityurin V., Grigorenko A. and al.* Plasma Assisted Combustion of Aluminum Dusty Particles in Water Stream // *50th AIAA aerospace sciences meeting.* AIAA. – 2012-0664. – P.12.
7. *Gutsol A, Rabinovich A, and Fridman A.* Combustion–assisted plasma in fuel conversion // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2011. – Vol. 44. – P. 274001 (14pp).

8. Райст П. Аэрозоли. Введение в теорию.: Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 280с.
9. Фортвов В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А. и др. Пылевая плазма // Успехи физических наук. – 2004. – Т. 174, №5. – С. 495 – 544.
10. Meshcheryakov O. Charge-Dipole Acceleration of Polar Gas Molecules towards Charged Nanoparticles: Involvement in Powerful Charge-Induced Catalysis of Heterophase Chemical Reactions and Ball Lightning Phenomenon //Journal of Nanomaterials. – 2010. – Vol. 2010. Article ID 654389. – 38 pages.
11. Полетаев Н. И. Образование конденсированных продуктов сгорания в пылевых пламенах металлов: стадия коагуляции // Физика горения и взрыва. – 2015. – Т. 51, №4. – С. 51-65.
12. Смирнов Б.М. Ионы и возбужденные атомы в плазме – М.:Атомиздат, 1974.– 456 с

**Starikov M. A., Khlebnikova M. E., Bulanin Ph. K., Sidorov A. E.,  
Poletaev N. I., Shevchuk V. G.**

### **Dispersed liquid and solid fuels combustion in an electrical discharge presence.**

#### SUMMARY

*The preliminary results of two-phase flame in the presence of high-voltage, high-frequency electric discharges are presented. The investigations were carried out for liquid and solid organic fuel dispersed in air, as well as a dust flame of metal particles. The streamer discharge influence on gas-dispersed fuel combustion and flame condition stabilization is investigated. The basic physicochemical mechanisms of a two-phase medium ionization effect on the homogeneous and heterogeneous reactions kinetics together with mass-heat transfer processes in nonequilibrium dusty plasma conditions during the single particles and aerosuspensions combustion are discussed.*

**Стариков М. А., Хлебнікова М. Є., Буланін Ф. К., Сидоров А. Е.,  
Полетаєв Н. І. Шевчук В. Г.**

### **Горіння диспергированного рідкого і твердого палива в присутності електричних розрядів.**

#### АНОТАЦІЯ

*В роботі наведено попередні результати експериментальних досліджень двофазного полум'я рідкого і твердого органічного палива яке розпилено в повітрі, а також пилового полум'я частинок металів в присутності високовольтних, височастотних електричних розрядів. Досліджено вплив стримерних розрядів в газі на інтенсифікацію горіння і умови стабілізації газодисперсних систем. Обговорюються основні фізико-хімічні механізми впливу іонізації двофазного середовища на кінетику гомогенних і гетерогенних реакцій, процеси масо-теплопереносу в умовах нерівноважної пилової плазми при спалюванні поодиноких частинок та їх газозависів.*

УДК 536.4

**Калінчак В. В., Черненко О. С., Сікорський М. В.,  
Бритавський Є. В., Стукалов С. А.**

*Одеський національний університет імені І. І. Мечникова  
E-mail: teplophys@onu.edu.ua*

### **Експериментальні дослідження безполум'яного горіння газових сумішей з домішками аміаку, водню та ацетону на платиновому дротикі**

Приводяться експериментальні дані залежності температури платинової нитки від сили струму в повітрі при наявності в ній малих домішок ацетону, аміаку та водню. Дані залежності проявляють гістерезисний характер. При зменшенні сили струму можливе самовільне погасання гетерогенно-каталітичної реакції чи самопідтримуюче каталітичне горіння. Температура каталітичного горіння домішок газів пропорційна їх концентрації. Показано, що критичне значення сили струму, що відповідає каталітичному займанню малих домішок водню, зі збільшенням концентрації збільшується з концентрацією домішки.

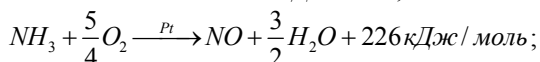
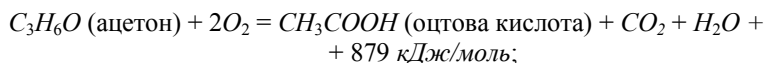
**Вступ.** Каталізатори в дисперсному вигляді відіграють виключну роль в живій природі: майже всі реакції в живих організмах завдяки біологічних каталізаторів протікають з великою швидкістю [1]. В промисловості широке застосування отримала металічна платина [2].

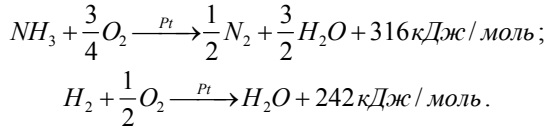
Каталітичне горіння газів звичайно протікає безпосередньо на поверхні твердих каталізаторів без відкритого полум'я в газовому середовищі. Саме тому таке горіння газів називають безполум'яним. Однак полум'я біля поверхні каталізатора може виникнути, якщо температура каталізатора підвищиться до температури займання газової суміші з високим вмістом горючого газу.

Принцип дії термокаталітичного газоаналізатора оснований на безполум'яному згоранні горючих на поверхні каталітичного активного елементу і вимірюванні кількості теплоти, що виділяється, яка пропорційна концентрації домішки газу [3]. Таким методом часто визначають вміст  $CO$ ,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $NH_3$ ,  $CH_4$ .

Найбільш відомим прикладом безполум'яного горіння газів є дослід «ацетонний ліхтарик», що проявляється в світінні попередньо прогрітого мідного чи платинового дротика у вигляді спіралі в колбі з налитим на дно ацетоном. Світіння продовжується до тих пір, поки не закінчиться випаровування ацетону, чи його концентрації знизиться до певної критичної величини. Якщо дротик не звернутий в густу спіраль, то в реакції не вистачає тепла для компенсації тепловтрат.

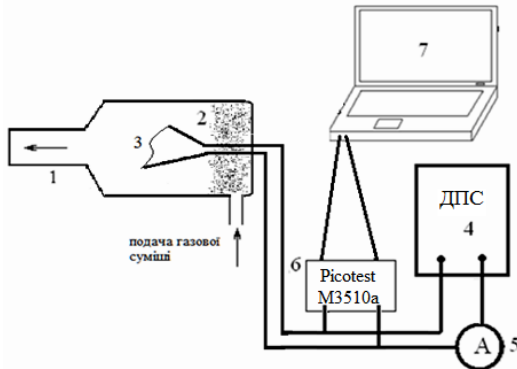
В даній роботі вибрано каталітичне окислення аміаку, ацетону та водню на платиновому дроті, яке може протікати відповідно до рівнянь:



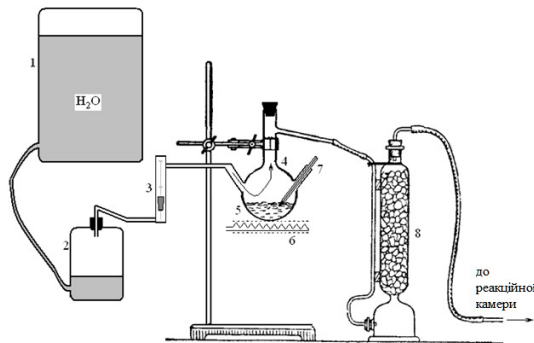


Метою даної роботи стала реалізація експериментальної установки для кількісного описання умов безполум'яного горіння газів на металевих дробках та визначення концентрації домішки горючого газу в суміші.

**Експериментальна установка.** Експериментальне дослідження безполум'яного горіння аміаку та ацетону проводилися на тонкій платиновій нитці (рис.1), по якій протікає електричний струм, шляхом вимірювання вольт-амперної характеристики і середньої температури нитки. Такі вимірювання фізично об'єктивні, але вимагають, як і всі температурні вимірювання, суворого

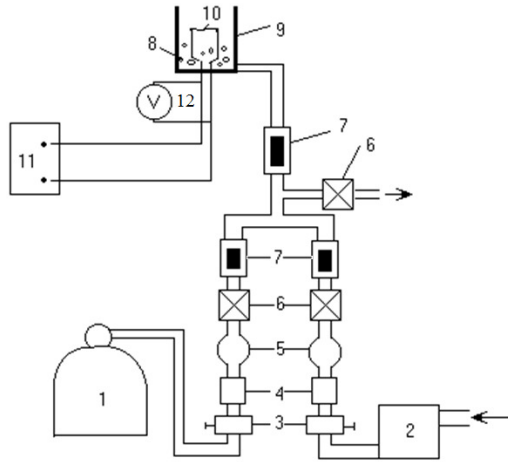


**Рис. 1.** Первинний пристрій: 1 – колба, 2 – поруватий матеріал, 3 – платинова нитка, 4 – джерело постійного струму Б5-47, 5 – амперметр М890G, 6 – мультівольметр Picotest M3510a, 7 – комп'ютер



**Рис. 2.** Система подачі сухої газоповітряної суміші з домішками горючого газу: 1, 2 – ємності з водою, 3 – ротаметр, 4 – колба, 5 – ацетон або аміачна вода, 6 – нагрівач, 7 – термометр, 8 – осушувач (негашене вапно CaO)





**Рис. 3.** Експериментальна установка: 1 – балон з воднем, 2 – повітряний компресор, 3 – редуктори, 4 – фільтри, 5 – фільтри Шота, 6 – крани, 7 – ротаметри, 8 – насадка, 9 – реакційний посуд, 10 – платинова нитка, 11 – джерело постійного струму Б5-47, 12 – мультівольметр Picotest M3510A.

врахування всіх факторів, що впливають на тепловий процес. Для цього була створена експериментальна установка, що включає в себе: 1) експериментальний стенд (рис.1), 2) система для створення і подачі газоповітряної суміші (рис.2).

Система для створення і подачі газоповітряної суміші (рис.2) складається з сполучених посудин, трубок, витратоміра, осушувача повітря, судини для рідини з часткою горючої речовини, нагрівача. В посуд наливається горюча рідина чи її водяний розчин. Внаслідок випаровування над поверхнею рідини утворюється насичена пара як води так і пари горючого газу. В даній роботі використовувалися в колбі в якості рідин, що випаровуються 10% водний розчин аміаку та 50% водний розчин ацетону.

Відмінною особливістю ацетону являється те, що він швидко випаровується і пар достатньо швидко становиться насиченим в невеликому реакційному об'ємі. Так при 20 °С тиск насиченого пару становить 22.8 кПа. Згідно Закону Рауля над 50 % водним розчином ацетону тиск насиченого пару становить 11.4 кПа, що складає 12.5 об'ємних %. Тиск насиченого пару аміаку над поверхнею 10% водного розчину при 20°С становить 29.6 кПа, що складає 29.6 об'ємних %

Наявність нагрівача дозволяє змінювати не лише швидкість випаровування, але і концентрацію насиченої пари над рідиною. Велика і мала сполучені посудини дозволяють створити практично рівномірний повітряний потік, що поступає в посудину з насиченим паром і виходить, збагатившись ним, до реакційної камери, де і утворюється реакційна суміш з меншою концентрацією горючого газу навколо платинової нитки.

Блок-схема експериментальної установки для дослідження гетерогенної реакції водню представлена на рис.3. Газова суміш повітря з домішками водню утворювали за допомогою компресора і хімічно чистого водню з балону. Регуляція і зміна об'ємів газів відбувалася за допомогою ротаметрів, кранів та газових редукторів. Для надійної роботи ротаметрів газу очищуються при проходженні грубих фільтрів та фільтрів Шота.

Отримана суміш подавалася в скляну колбу через спеціальну насипку для утворення стаціонарного потоку.

Основними елементами установок являються реакційні колби, що представляють собою зрізані манометричні лампи ПМТ-2, які в конструкції мітять платинову нитку. Нагрів платинової нитки здійснюється за допомогою стабілізованого джерела струму.

Проведені експериментальні дослідження зводилися до отримання вольт-амперної характеристики платинового дротику і визначення її середньої температури в заданих умовах (концентрація горючої речовини в газовій суміші, швидкості потоку газової суміші, сила нагріває струму і т. д.).

Методика вимірювань полягала у виконанні наступних дій:

1. Задавання концентрації горючого газу в газоповітряному потоці, що надходить в реакційну посудину.

2. Зміна струму в ланцюзі дроту проводилося від 0.01А до 0.8 А та в зворотному напрямку. Вимірювання падіння напруги на кінцях дроту відбувається після кожного кроку збільшення струму за допомогою мультивольтметра (рис.1, 3), що дозволяє з високою точністю вимірювати одночасно і зберігати значення струму і напруги на кінцях дроту.

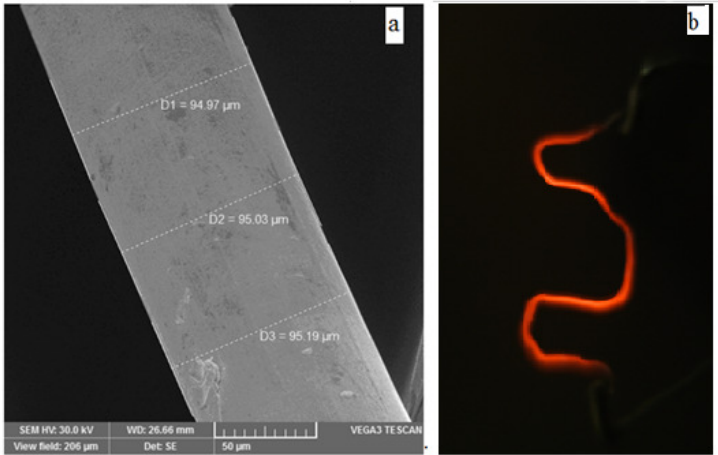
3. Проведення вимірювань в атмосфері, і повторення процесу, але вже з газоповітряним потоком, і порівняння цих двох значень.

Для того, щоб пересвідчитись у тому, що наш нагрівач являється саме платиновим, та пересвідчитись у відсутності великої кількості домішок, які можуть вплинути на результати експерименту, було проведено рентгеноструктурний аналіз платинового дротику. Рентгеноструктурний аналіз платини проводився на установці УРС-55А. Зйомка проводилась на  $CuK\alpha$ -випромінюванні ( $\lambda = 1,452\text{\AA}$ ) при напрузі 45 кВ та силі струму 15 мА по методу Дебая-Шерера в камері РКД.

Рентгенограма показала, що дротик, використаний в експерименті являється платиновим, домішки можливо і присутні, але виходячи з того, що період решітки платини на рентгенограмі не змінився, з цього можемо зробити висновок, що кількістю домішок в ньому можна знехтувати.

За допомогою електронного мікроскопу було проведено вимірювання діаметру платинового дротику та його флуктуації в залежності від довжини (рис. 4а). В результаті отримало, що середній діаметр планового дротика складає 95 мкм. Отримане значення дуже важливе, бо необхідне для правильного визначення середньої температури дротика.

Таким чином платиновий дріт діаметром  $d = 0.095$  мм і довжиною  $L = 56$  мм містився у вільному повітряному просторі в колбі, в яку поступають пари



**Рис. 4.** Знімок платинового дротику а) під електронним мікроскопом (середній діаметр 95 мкм) та б) при каталітичному окисненні газоповітряної суміші з домішками горючого газу

горючого газу. Питомий опір платини при  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  становить  $\eta_0 = 9.81 \cdot 10^{-8}\text{ Ом}\cdot\text{м}$ , а температурний коефіцієнт опору  $\gamma = 39.1 \cdot 10^{-4}\text{ 1/K}$ .

Використовуючи 4-х дротову схему вимірювання опору, отримані при температурі повітря  $22.7\text{ }^{\circ}\text{C}$ , з вирахуванням опору підвідних проводів вимірювального вольтметра  $0.012\text{ Ом}$ , опір платинової нитки  $R_{Pt} = 0.853\text{ Ом}$  і опір підвідних проводів вимірювальної установки  $R_{np} = 0.12\text{ Ом}$ .

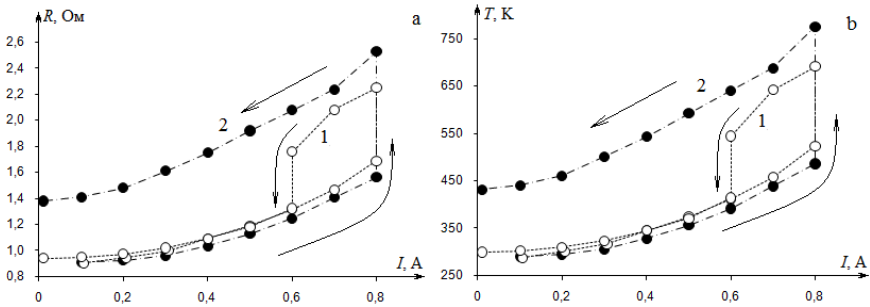
**Аналіз отриманих результатів.** Проведені експериментальні дослідження зводилися, в кінцевому вигляді, до отримання вольт-амперної характеристики нагрітого дротику (4b) і визначення його середньої температури в заданих умовах (концентрація горючого газу в газовій суміші, швидкість потоку газової суміші, сила нагрівачого струму і т.д.).

На рис. 5 та 6 представлені залежності опору і температури дроту від сили нагрівачого струму в повітрі, ацетон-повітряній та аміачно-повітряній сумішах. При збільшенні і наступному зменшенні нагрівачого струму температура нитки в повітрі не залежить від напрямку зміни параметрів процесу. Опір дроту визначається відповідно до закону Ома з абсолютною похибкою вимірювання:

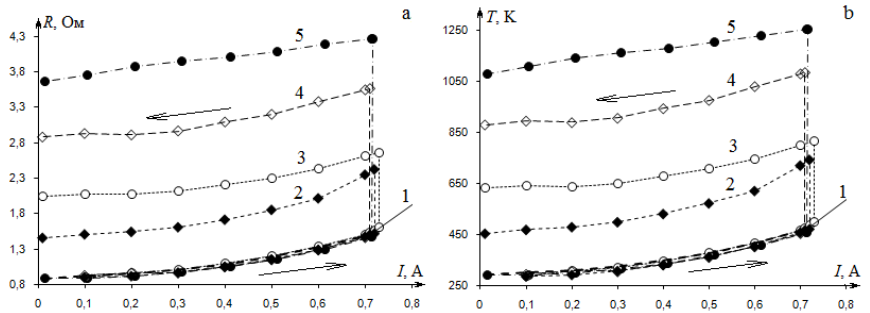
$$R = \frac{U}{I} - R_{np}, \quad \Delta R = R \sqrt{\left(\frac{\Delta I}{I}\right)^2 + \left(\frac{\Delta U}{U}\right)^2}.$$

Середня температура дроту визначається з лінійної залежності опору дроту від температури:

$$R = R_0 (1 + \gamma(T - T_0)), \quad R_0 = \eta_0 \frac{4L}{\pi d^2} = 0.775\text{ Ом}.$$



**Рис. 5.** Залежність опору і стаціонарної температури платинового дроту діаметром  $d = 0.095$  мм і довжиною  $L = 56$  мм в аміачно-повітряній суміші, від сили нагрівачого струму при різних об'ємних концентраціях домішки **аміаку**  $Y_{a,v}$ : 1) 2.5%, 2) 3.5%. Температура  $T_g = T_w = 295$  К. Витрата суміші  $6 \text{ см}^3/\text{с}$ . Крива 1, 2 аміачно-повітряна суміш в порядку збільшення концентрації



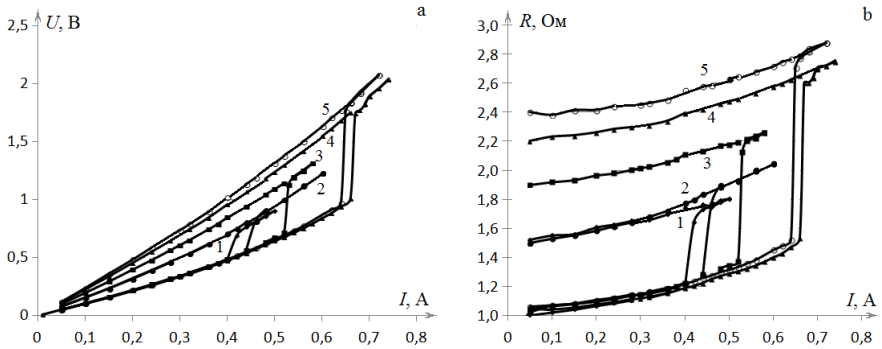
**Рис. 6.** Залежність опору і стаціонарної температури платинового дроту діаметром  $d = 0.095$  мм і довжиною  $L = 56$  мм в ацетон-повітряній суміші, від сили нагрівачого струму при різних об'ємних концентраціях домішки **ацетону**  $Y_{a,v}$ : 1) 0 (повітря), 2) 0.7%, 3) 1.1 %, 4) 2.0 %, 5) 2.8 %. Температура  $T_g = T_w = 295$  К. Витрата суміші  $6 \text{ см}^3/\text{с}$

Звідси температура дроту і абсолютна помилка вимірювання температури визначаються як:

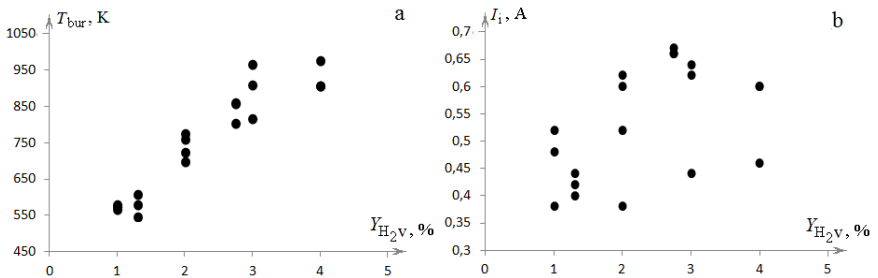
$$T = T_0 + \frac{1}{\gamma} \left( \frac{R}{R_0} - 1 \right).$$

В повітрі з домішками горючого газу (рис.6, крива 1) до деякого значення сили нагрівачого струму дріт поводить як інертний. При силі струму, різної для різної суміші відбувається різке підвищення стаціонарної температури. Збільшення вмісту горючого газу незначним чином зменшує критичне значення сили струму (рис. 5,6), але істотно впливає на рівень температур високотемпературних станів.

При зменшенні сили струму в режимі каталітичного горіння існують два можливих варіанти в залежності від концентрації горючого газу: 1) самовільне



**Рис. 7.** Залежність напруги на кінцях платинової нитки і її опору від квадрату сили струму (режим стабілізації сили струму) при відносній молярній(об’ємній) концентрації водню 1) 1%, 2) 1.3%, 3) 2%, 4) 2.75% і 5)3.3%. Швидкість обтікання нитки зуміщено 2.5 см /с. Температура суміші 294К. Довжина платинової нитки 5.8 см, діаметр 95 мкм



**Рис. 8.** Зависимость температуры каталитического горения и критического значения силы тока самовоспламенения от концентрации примеси водорода при относительной молярной концентрации водорода 1) 1%, 2) 1.3%, 3) 2%, 4) 2.75% и 5)3.3%. Скорость обтекания смеси 2.5 см /с. Температура смеси 294К. Длина платиновой проволоки 5.8 см, диаметр 100 мкм

погасання – зворотний стрибок на низькотемпературний режим при більш низькому значенні сили струму (рис.5, крива 1) чи 2) самопідтримуюче каталітичне окислення при вимкненому струмі (рис.5, крива 2; рис.6, криві 2-5).

Ацетон легко займається. Температура його самозаймання рівна 738 К (+465 С). Повітряні суміші, що містять від 2.5 % до 12.8 % (по об’єму) вибухонебезпечні. Тому на високотемпературній гілці вольтамперної характеристики можна спостерігати займання ацетон-повітряної суміші поблизу каталізатора, що супроводжується звуковим ефектом.

Як показано в [4] діапазон концентрацій аміаку при якому можливе самовільне погасання гетерогенної каталітичної реакції на нагрітому каталізаторі невеликий: 1.5 – 2.3 масових %. Для ацетону він ще вужчий.

Аналогічні явища спостерігаються і при каталітичному окисленні газоповітряної суміші з домішкою водню на платиновій нитці (рис. 7). В середині гістерезисної петлі (при силах струму менших за критичні  $I < I_c$ ) перехід на високотемпературну гілку відбувається, якщо початкова температура дроту вище критичної температури запалювання [5]. Чим більше сила струму, тим менше повинна бути початкова температура запалювання.

При зменшенні концентрації до 0.75 об'ємних% водню відбувається виродження гістерезисної області на залежності стаціонарної температури (опору) каталізатора від сили струму.

На рис. 8 показано вплив концентрації водню в суміші на критичне значення сили струму самозаймання та температуру каталітичного горіння домішки водню в повітрі на платиновій нитці.

Спостерігається лінійне збільшення температури каталітичного горіння домішок водню зі зростанням концентрації газової домішки (рис. 8а). Це дозволяє багаторазово використовувати платинову дріт як первинного перетворювача в термохімічній сенсорі.

Помітною відмінністю від попередніх результатів є не зменшення сили струму при каталітичному займанні водню з ростом концентрації, а повністю навпаки, тобто збільшення (рис.8б). Можна відзначити істотний розкид отриманих критичних значень сили струму, проте, в певному інтервалі значень сил струму. При виконанні дослідів платинова нитка не піддавалася додатковій обробці після кожного з дослідів. Тому отримані результати в першу чергу можна пояснювати зміною властивостей поверхні платинового дроту при її нагріві до високих температур і її спіканні.

**Висновки.** Таким чином, на основі проведених експериментальних досліджень показана реалізація безполум'яного горіння малих домішок ацетону, аміаку та водню в повітрі на тонкій платиновій нитці в результаті її нагрівання електричним струмом. Показана лінійна залежність температури платинової тинки в режимі каталітичного безполум'яного горіння від концентрації горючого газу та можливість її використання в якості робочого елемента газаналізатора без попередньої обробки поверхні.

#### Література:

1. Гликин М. А. Аэрозольный катализ // Теоретические основы химической технологии. – 1996. – Т. 30, № 4. – С. 430–434.
2. Пармон В.Н., Симонов А.Д., Садыков В.А., Тихов С.Ф. Каталитическое сжигание: достижения и проблемы // Физика горения и взрыва. – 2015.– № 2. – С. 5-13.
3. Еремина Б.Г. Газовый анализ. – Л. :Госхимиздат, 1955. – 380 с
4. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – Москва: Наука, 1987. – 502 с.
5. Kalinchak V.V, Chernenko A.S. and Kalugin V.V. Critical condition limits for the high temperature oxidation of gases on a catalyst particle // Kinetics and Catalysis. – 2014. – Vol. 55, No. 3. – P. 269–277.

**Калинчак В. В., Черненко А. С., Сикорский М. В.,  
Бритаевский Е. В., Стукалов С. А.**

**Экспериментальные исследования беспламенного горения газовых смесей  
с примесями аммиака, водорода и ацетона на платиновой проволоке**

**АНОТАЦІЯ**

*Приводятся экспериментальные данные зависимости температуры платиновой нити от силы тока в воздухе при наличии в ней малых примесей ацетона, аммиака и водорода. Данные зависимости проявляют гистерезисный характер. При уменьшении силы тока возможно самопроизвольное погасание гетерогенно-каталитической реакции или самоподдерживающее каталитическое горение. Температура каталитического горения примесей газов пропорциональна их концентрации. Показано, что критическое значение силы тока, соответствующее каталитическому воспламенению малых примесей водорода, с увеличением концентрации увеличивается с концентрацией примеси.*

**Kalinchak V. V., Chernenko A. S., Sikorsky M. V., Brytavsky E. V.,  
Stukalov S. A.**

**Experimental studies of the flameless combustion of gas mixtures with  
impurities of ammonia, hydrogen and acetone on a platinum wire**

**SUMMARY**

*Platinum filament temperature dependence via current in the air, considering small acetone, ammonia and hydrogen impurities presence experimental data is presented in the paper. These dependencies exhibit hysteresis. With a decrease in current, spontaneous extinction of a heterogeneous catalytic reaction or self-sustaining catalytic combustion is possible. The temperature of the catalytic combustion impurity gases is proportional to their concentration. It is shown that the critical value of the current, corresponding to the catalytic ignition of small hydrogen impurities, increases with concentration of the impurity with increasing concentration.*

УДК 536.46

**Буланин Ф. К., Сидоров А. Е., Киро С. А., Полетаев Н. И., Шевчук В. Г.**

*ОНУ ім. І.І. Мечникова, Інститут горення і нетрадиційних технологій*

## **Критические условия воспламенения газозвеси энергоемких соединений**

*Бор является перспективным веществом в качестве энергоемкой добавки к ракетным топливам, однако имея высокую температуру воспламенения, может быть использован в составе соединений с металлами – боридов. Реализация потенциальных возможностей боридов металлов, возможна в условиях, обеспечивающих их воспламенение. В данной работе были проведены теоретические исследования процесса воспламенения боридов  $MgB_2$ ,  $TiB_2$  и  $ZrB_2$  на основании модели для гетерогенных систем с параллельными реакциями. Анализ показал, что воспламенение может происходить в теплокинетическом, либо в термокинетическом режиме. Получены соотношения для расчета пределов воспламенения и введена условная граница смены преобладающих механизмов воспламенения.*

**Введение.** Одним из путей совершенствования пиротехнических систем различного назначения является увеличение энергоемкости топливных композиций. Перспективным горючим с этой точки зрения является порошкообразный бор, уступающий по объемной калорийности только бериллию. В отличие от нашедших широкое применение в ракетных топливах алюминия и магния, бор является трудновоспламеняемым и относительно медленно горящим элементом [1 – 4], что влечет за собой необходимость введения в топливную композицию инициаторов его воспламенения (прежде всего алюминия и магния [5]). Это обстоятельство, понятно, снижает как массовую, так и объемную калорийность такого гибридного горючего в сравнении с элементарным бором.

Перспективным в этом плане может оказаться использование боридов металлов, получаемых, в частности, методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Естественно, что и в этом случае объемная калорийность горючей композиции будет ниже объемной калорийности бора, поскольку часть тепла будет потеряна еще в процессе синтеза. Вместе с тем, увеличится (в сравнении с менее плотным образованием из механической смеси порошков боридов и активатора) плотность получаемого методом СВС соединения, что может дать эффект увеличения энергоемкости горючего. Имеются свидетельства, что бориды металлов перспективны в качестве добавок к твердым ракетным топливам [6, 7, 8].

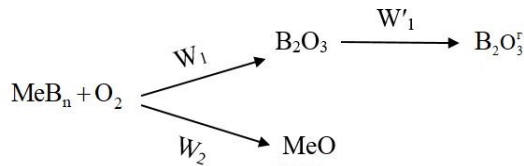
Реализация этих потенциальных способностей возможна только в условиях, обеспечивающих их воспламенение. Поэтому первоочередной задачей является теоретическое и экспериментальное исследование критических условий воспламенения боридов в сравнении с таковыми для исходных компонентов соединения. В данной работе при теоретическом исследовании в качестве базовой модели использован подход [9], разработанный для гетерогенных систем с па-



раллельными реакциями, хорошо зарекомендовавший себя при расчете процессов воспламенения частиц карбида бора [10]. Экспериментальные исследования проводились по методике, предложенной в [11].

**Материалы и методики исследования.** При построении теоретической модели, описывающей процесс воспламенения аэрозвеси частиц бинарного соединения  $MeB_n$  (металл  $Me$  в чистом виде окисляется по линейному закону) будем полагать:

1. Окисел  $MeO$  окалины не обладает защитными свойствами, т.е. диффузионное сопротивление окалины сплава создается слоем борного ангидрида (критерий Пиллинга-Бедворса  $\beta = 2,46$ ). Окислы  $MeO$  и  $B_2O_3$  не взаимодействуют друг с другом.
2. Доля поверхности частицы, занимаемая каждым из компонентов, пропорциональна их мольной доле в сплаве. Содержание бора в сплаве достаточное, чтобы обеспечить образование сплошного защитного слоя  $B_2O_3$ .  
 $B + O_2 \rightarrow B_2O_3 \rightarrow B_2O_3^g$
3. Образование конечных продуктов реагирования  $MeB_n$  описывается следующей схемой:



где  $W'_1$  – скорость испарения  $B_2O_3$ .

Скорости образования  $B_2O_3$  ( $W_1$ ) и  $MeO$  ( $W_2$ ) могут быть представлены в виде [11] (пренебрегается выгоранием горючего и окислителя за предвоспламенительный период):

$$W_1 = \frac{v_1 C_{O_2}^\infty}{\frac{1}{\xi \sigma_1 \kappa_1} + \frac{1}{\xi \chi \left(1 + \frac{\sigma_2 \kappa_2}{\sigma_1 \kappa_1}\right)}}, \quad W_2 = \frac{v_2 C_{O_2}^\infty}{\frac{1}{\xi \sigma_2 \kappa_2} + \frac{1}{\xi \chi \left(1 + \frac{\sigma_1 \kappa_1}{\sigma_2 \kappa_2}\right)}}, \quad \chi = \frac{\chi_0}{h} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

где  $\sigma_i$  – доля поверхности сплава, занимаемая  $i$ -м элементом;  $\chi$  – константа скорости диффузии через слой окиси  $B_2O_3$ ;  $\xi$  – постоянная Генри;  $C_{O_2}^\infty$  – массовая концентрация окислителя в объеме аэрозвеси;  $\kappa_i$  – константы скорости химических реакций образования окислов;  $v_i$  – массовые стехиометрические коэффициенты по окислителю; индексы: 1 – реакция окисления B, 2 – вещества Me.

Испарение жидкой окиси  $B_2O_3$  можно формально представить в виде реакции с тепловым эффектом  $L$  ( $L < 0$ ) и скоростью  $W'_1 \approx A \exp\left(-\frac{\Phi}{RT}\right)$ , протекаю-

щей последовательно с реакцией окисления В и приводящей к удалению окиси В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>.

4. Тепловым влиянием реакции разложения бинарного сплава на элементы, градиентом температуры по радиусу частицы и стефановским потоком будем пренебрегать [13].
5. Температура газа одинакова по всему объему облака, частицы сплава имеют одинаковую температуру, размер и равномерно распределены по объему сосуда, температура стенок которого постоянна. С учетом этих упрощений, безразмерная система уравнений, описывающая тепловой режим реагирования аэрозвеси частиц сплава будет иметь следующий вид:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\theta}{d\tau} &= \frac{1}{\frac{z}{e^{\frac{1}{1+\beta\theta}}} \left[ 1 + f_1 e^{\frac{\theta(a_2-a_1)}{1+\beta\theta}} \right] + f_2 e^{\frac{-a_1\theta}{1+\beta\theta}} + \frac{L\omega}{q_1} e^{\frac{a\theta}{1+\beta\theta}} +} \\ &+ \frac{q_2 v_2}{q_1 v_1} \cdot \frac{1}{\frac{z}{e^{\frac{1}{1+\beta\theta}}} \left[ 1 + \frac{1}{f_1} e^{\frac{\theta(a_1-a_2)}{1+\beta\theta}} \right] + \frac{f_2}{f_1} e^{\frac{-a_2\theta}{1+\beta\theta}} - \frac{\theta - \theta_z}{\Omega}} - \frac{\theta - \theta_z}{\Omega} \\ \frac{d\theta_z}{d\tau} &= \frac{B}{1-B} \frac{\theta - \theta_z}{\Omega} - \frac{B}{1-B} \frac{\theta_z - \theta_0}{A\Omega} \\ \frac{dz}{d\tau} &= -\omega e^{\frac{a\theta}{1+\beta\theta}} + \frac{1}{\frac{z}{e^{\frac{1}{1+\beta\theta}}} \left[ 1 + f_1 e^{\frac{\theta(a_2-a_1)}{1+\beta\theta}} \right] + f_2 e^{\frac{-a_1\theta}{1+\beta\theta}}} \end{aligned} \right. \quad (1)$$

с начальными условиями  $\theta = \theta_n$ ,  $z_n = 1/\gamma$ ,  $\theta_z = \theta_{z,n}$

где

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{E}{RT_*^2} (T - T_*); \quad z = \frac{h}{h_n} \gamma; \quad a_i = \frac{E_i}{E}; \quad a = \frac{\Phi}{E}; \quad \beta = \frac{RT_*}{E} \\ \tau &= \frac{t}{\gamma} \cdot \frac{3E_1 v_1 q_1 \xi C_{O_2}^\infty \chi(T_*, h_n)}{c_s^* RT_*^2 h_0^2}; \quad \Omega = \frac{q_1 E \xi C_{O_2}^\infty \chi(T_*, h_n)}{(\alpha + 4\varepsilon \sigma T_0^{*3}) RT_*^2 \gamma}; \\ f_1 &= \frac{\sigma_2 k_2(T_*)}{\sigma_1 k_1(T_*)}; \quad f_2 = \frac{\chi(T_*, h_n)}{\gamma \sigma_1 k_1(T_*)}; \quad \gamma = \frac{r_0}{3h_n} \cdot \frac{c_s^* RT_*^2}{q_1 E} \cdot \frac{\rho_s}{\rho_{ок}}; \\ \omega &= \frac{\gamma W_1'(T_*)}{v_1 \xi C_{O_2}^\infty \chi(T_*, h_n)}; \quad A = \frac{\rho_g}{\rho_s} \cdot \frac{B}{1-B} \cdot \frac{Nu}{Nu_{cm}} \left( \frac{R_0}{r_0} \right)^2; \quad B = \frac{C_s}{C_s + \rho_g}; \end{aligned} \quad (2)$$

$T_*$  - искомая температура;  $T_0$  - начальная температура стенок;  $\rho_{s,g}$  - плотность твердой фазы и газа соответственно;  $L$  - удельная теплота испарения;  $q_i$  - удельная теплота химической реакции;  $\sigma^*$  - постоянная Стефана-Больцмана;

$C_s$  – концентрация твердой фазы;  $h_n$  – начальная толщина оксидной пленки;  $c_s^*$  – теплоемкость частиц бора;  $Nu$  – число Нуссельта для сферических частиц;  $Nu_{cm}$  – число Нуссельта на стенках сосуда, равное 4 [11];  $R_0$  – радиус реакционной трубы;  $r_0$  – радиус частицы.

Здесь первое уравнение описывает температурную динамику частицы, второе – газа, третье – толщины окиси  $B_2O_3$  на частице.  $\theta, \theta_s, z, \tau$  – безразмерные температура, толщина слоя окиси  $B_2O_3$  и время соответственно. Безразмерные параметры  $\Omega, \omega, \beta, \gamma, a, A, B$  – известны из теории воспламенения металлов [10,14,15]. Остальные безразмерные параметры обуславливаются данной постановкой задачи и характеризуют отношение скоростей химических реакций окисления компонент при масштабной температуре –  $f_1$ , отношение скоростей диффузии через слой  $B_2O_3$  к скорости его образования –  $f_2$  и различие в температурных зависимостях коэффициента диффузии через слой  $B_2O_3$  и скорости его образования ( $a_1$ ) и скорости образования  $MeO$  ( $a_2$ ).

Сравнивая систему уравнений (1, 2) с системой, описывающей воспламенение металлов с летучими пленками продуктов [10,14], отметим ряд отличий. Во-первых, протекания параллельной реакции окисления элемента  $Me$  сплава приводит к появлению слагаемого в (1), описывающего скорость тепловыделения этой реакции. Во-вторых, скорости процессов окисления обоих компонент сплава записаны с учетом как кинетического, так и диффузионного по пленке окиси  $B_2O_3$  сопротивлений окислению. И, наконец, при протекании параллельных реакций, вследствие взаимного влияния реакций друг на друга, возможно замедление одной из них, вызванное протеканием другой. Такие эффекты характеризуются слагаемыми  $ze \frac{\theta}{1+\beta\theta} f_1 e^{\frac{\theta(a_2-a_1)}{1+\beta\theta}}$  – при окислении  $B$  и  $ze \frac{\theta}{1+\beta\theta} \frac{1}{f_1} e^{\frac{\theta(a_1-a_2)}{1+\beta\theta}}$  –

при окислении элемента  $Me$ .

Характерной особенностью реагирования такой системы является наличие сложной обратной связи. На параллельные реакции окисления компонентов  $B$  и  $Me$  накладывается последовательный процесс испарения  $B_2O_3$ , оказывающий как тепловое, так и кинетическое (через толщину слоя  $B_2O_3$ ) влияние на суммарную скорость процесса.

Решение (1), удовлетворяющее начальным условиям, должно иметь вид:

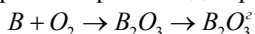
$$\theta = \theta(\tau, \Omega, \omega, f_1, f_2, a_2, a_1, a, \theta_n, \theta_0, A, B, z_n, \beta)$$

$$z = z(\tau, \Omega, \omega, f_1, f_2, a_2, a_1, a, \theta_n, \theta_0, A, B, z_n, \beta)$$

$$\theta_s = \theta_s(\tau, \Omega, \omega, f_1, f_2, a_2, a_1, a, \theta_n, \theta_0, A, B, z_n, \beta)$$

дающее безразмерные температуры частицы, газа и толщину слоя  $B_2O_3$  как функции от безразмерного времени с тринадцатью параметрами. Как и в [10, 14, 15], влияние параметров  $\beta, \theta_n, z_n$  на критические условия воспламенения незначительно, что подтверждается численным интегрированием (1) в широком диапазоне изменения  $\theta_n$  (от -10 до 0),  $z_n$  ( $\gamma \sim$  от 20 до 200) и  $\beta$  ( $\beta < 0,1$ ) и в дальнейшем рассматриваться не будет. Роль параметров  $\omega$  и  $a$  при протекании последовательных реакций уже рассматривалась [10, 12]. Авторы отмечают воз-

возможность существования двух механизмов воспламенения в зависимости от соотношения скоростей последовательных стадий ( $\omega$ ). Если скорость испарения  $B_2O_3$  в ходе разогрева частиц становится больше скорости ее образования, возникает дополнительное ускорение первой стадии реакции



– кинетический механизм самоускорения. Поэтому, воспламенение может происходить либо вследствие срыва теплового равновесия при накоплении на поверхности частиц защитной окиси  $B_2O_3$  ( $\omega \ll 1$ ), либо в результате взаимодействия обоих факторов – теплового и кинетического самоускорения, когда резкое увеличение температуры системы, неразрывно связанное с нарушением теплового равновесия, совпадает с удалением защитной окиси  $B_2O_3$  ( $\omega \gg 1$ ). Первый из указанных механизмов воспламенения называют теплокинетическим, второй – термокинетическим.

Для теплокинетического механизма воспламенения ( $\omega \ll 1$ ) имеет место существенно нестационарный режим реагирования, для которого при описании закономерностей воспламенения роль производной  $\frac{dz}{d\tau}$  велика, а стационарные подходы для нахождения критических условий оказываются неприемлемыми [10]. Для термокинетического ( $\omega \gg 1$ ) возможно уже существование квазистационарного режима, что позволяет применить методы стационарной теории для отыскания критических условий воспламенения.

Поскольку безразмерные параметры  $\omega$  и  $a$  для сплава MeB по постановке задачи совпадают с введенными в [10,14], то будем считать, что и для последовательно-параллельных реакций (1) роль параметра  $\omega$  в определении механизма воспламенения сохраняется.

Исходя из качественных особенностей окисления и воспламенения исследуемых сплавов, нас будет интересовать влияние режимов реакций окисления компонентов (параллельных стадий) на термокинетический механизм воспламенения, и поэтому будем полагать:  $\omega \gg 1$ ,  $a > 1$ .

При анализе (1, 2) будем считать равными температуру частиц, газа в начальный момент времени и стенок реакционного сосуда –  $\theta_n = \theta_{e,n} = \theta_0$ . В качестве масштабной температуры в этом случае естественно выбрать температуру стенок реакционного сосуда  $T_* = T_0$ . Такое упрощение будем использовать только при нахождении критических температур воспламенения.

Пусть режим реагирования бинарного сплава MeB в начальный момент будет диффузионным по слою защитной окиси  $B_2O_3$ , т.е.  $\chi(T_0, h_n) \ll \{\sigma_1 k_1(T_0), \sigma_2 k_2(T_0)\}$  или в безразмерном виде  $f_2 \ll 1$ ,  $\frac{f_2}{f_1} \ll 1$ .

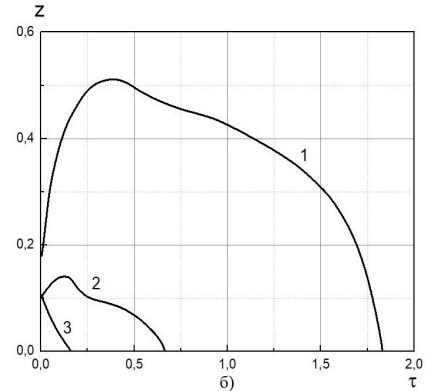
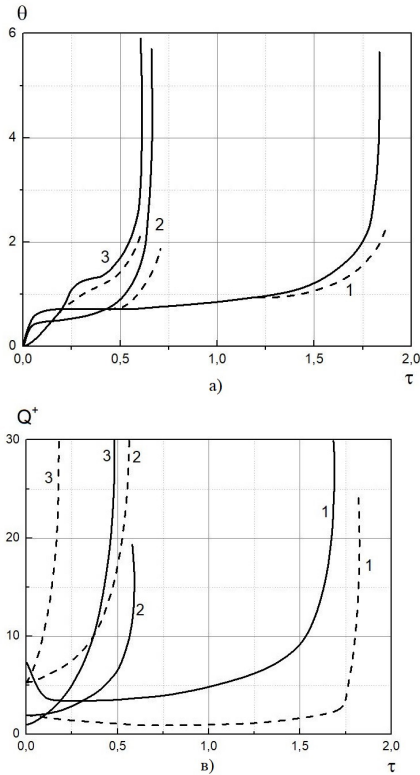
Тогда, полагая, что диффузионный по слою  $B_2O_3$  режим реагирования сплава не нарушается в процессе воспламенения, систему уравнений (1) можно упростить:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\theta}{d\tau} &= \frac{e^0}{z \left[ 1 + f_1 e^{\theta(a_2 - a_1)} \right]} + \frac{q_2 v_2}{q_1 v_1} \cdot \frac{1}{z \left[ 1 + \frac{1}{f_1} e^{\theta(a_1 - a_2)} \right]} - \frac{L}{q_1} e^{a\theta} - \frac{\theta - \theta_c}{\Omega} \\ \frac{d\theta_c}{d\tau} &= \frac{B}{1-B} \cdot \frac{\theta - \theta_c}{\Omega} - \frac{B}{1-B} \frac{\theta_c - \theta_0}{A\Omega} \\ \frac{dz}{d\tau} &= \frac{e^0}{z \left[ 1 + f_1 e^{\theta(a_2 - a_1)} \right]} - \omega e^{a\theta} \end{aligned} \right. \quad (3)$$

Сопоставление интегральных кривых  $\theta(\tau)$ ,  $z(\tau)$  и  $\theta_c(\tau)$ , полученных численным интегрированием упрощенной (3) и исходной систем уравнений при  $f_2 \ll 1$  в широком диапазоне изменений  $f_1$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  показало, что количественный и качественный ход кривых  $\theta(\tau)$ ,  $z(\tau)$  и  $\theta_c(\tau)$  совпадает лишь до значений параметра  $f_1$  меньше некоторого  $f_1^0$ . Характерные зависимости  $\theta(\tau)$ ,  $z(\tau)$  и  $\theta_c(\tau)$ , полученные численным интегрированием (1) при  $f_2 \ll 1$  вблизи предела воспламенения, приведены на рис. 1. ( $\omega=1$ ,  $f_2=10^{-2}$ ,  $\frac{q_2 v_2}{q_1 v_1}=0,5$ ;  $\frac{q_1}{L}=-0,3$ ;  $a_1=1$ ,  $a=2$ ;

$f_1^0=10$ ,  $B=0,2$ ;  $A=180$ ). При  $f_1 < f_1^0$  (кривые 1,2) резкое увеличение температуры частицы по времени совпадает с удалением защитного слоя  $V_2O_3$ , что характерно для термокинетического воспламенения. При  $f_1 > f_1^0$  (кривые 3), в предвоспламенительный период слой окиси  $V_2O_3$  полностью удаляется с поверхности индивидуальных частиц (скорость испарения  $V_2O_3$  превосходит скорость его образования в течение всего предвоспламенительного периода) и, в дальнейшем, скорость процесса окисления регулируется исключительно кинетикой гетерогенных реакций окисления компонентов сплава (в основном  $Me$ , т.к.  $f_1 \gg 1$ ). Следовательно, при  $f_1 > f_1^0$  диффузионный режим окисления в процессе воспламенения не может быть реализован. Это можно объяснить селективным окислением элемента  $Me$  сплава ( $f_1 \gg 1$ ), вызванным протеканием доминирующей реакции.

Оценим граничное значение  $f_1^0$ . Достаточным условием смены режимов реагирования в процессе воспламенения является условие  $\frac{dz}{d\tau} < 0$ , выполняющееся в течение всего предвоспламенительного периода. Для этого необходимо, чтобы в начальный момент времени величина параметра  $f_1$ , превышала величину  $f_1^0 = \frac{1}{z_n \omega} = \frac{\gamma}{\omega}$ , найденную из условия  $\left. \frac{dz}{d\tau} \right|_{\tau=0} = 0$ . При  $a < 1 + a_1 - a_2$  значение  $f_1^0$  необходимо увеличить в  $e^{\theta_{кр}(1+a_1-a_2-a)}$  раз, где  $\theta_{кр}$  – максимальный критический разогрев.



**Рис. 1** Зависимость безразмерных температур частицы  $\theta$  и газа (а), толщины окиси пленки  $z$  окиси  $B_2O_3$  (б) и скорости тепловыделений  $Q_g^+$  реакций  $B+O_2$  и  $Me+O_2$  (в) от времени, сплошные кривые  $\theta(\tau)$ ,  $z(\tau)$  и  $Q_g^+$ ; пунктирные кривые –  $\theta_g(\tau)$ ,  $\theta_{Me}^+$ ; кривые: 1)  $\Omega = 1.3 \cdot 10^{-3}$ ,  $f_1 = 0.2$ ; 2)  $\Omega = 3.1 \cdot 10^{-4}$ ,  $f_1 = 5$ ; 3)  $\Omega = 3.8 \cdot 10^{-5}$ ,  $f_1 = 50$

Таким образом, при  $f_1 > f_1^0 \sim \gamma/\omega$  в процессе предпламенного разогрева частицы сплава происходит смена режимов реагирования от диффузионного, по слою окиси  $B_2O_3$ , к кинетическому. С учетом вышеизложенного систему уравнений (1, 2) можно переписать (пренебрегая уравнением для изменения толщины слоя  $B_2O_3$ ) в виде:

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{d\tau} = \left(1 + \frac{L}{q_1}\right) \frac{e^{a_1\theta}}{f_2} + \frac{q_2 v_2}{q_1 v_1} \cdot \frac{f_1}{f_2} e^{a_2\theta} - \frac{\theta - \theta_g}{\Omega} \\ \frac{d\theta_g}{d\tau} = \frac{B}{1-B} \cdot \frac{\theta - \theta_g}{\Omega} - \frac{B}{1-B} \frac{\theta_g - \theta_0}{A\Omega} \end{cases} \quad (4)$$

При записи (4) учтено, что суммарная скорость последовательной реакции  $B + O_2 \rightarrow B_2O_3 \rightarrow B_2O_3^g$  определяется скоростью наиболее медленной стадии  $e^{a_1\theta}/f_1$ , а тепловой эффект образования  $B_2O_3$ , согласно закону Гесса, равен  $1 + q_1$ .

Критические условия воспламенения в этом случае могут быть получены как условия потери устойчивости стационарных режимов (4). Выполняя несложные преобразования на пределе воспламенения можно получить в виде:

$$\left\{ \begin{aligned} a_1 \left( 1 + \frac{L}{q_1} \right) \frac{\Omega_{kp}}{f_2(1+A)} &= \left[ e^{a_1 \theta_{kp}} \left( \frac{a_2}{a_1} \cdot \frac{q_2 v_2}{(L+q_1) v_1} f_1 - e^{-(a_1-a_2) \theta_{kp}} \right) \right]^{-1} \\ a_1 \theta_{kp} &= 1 - \frac{1 - a_1/a_2}{1 + \frac{a_2}{a_1} \cdot \frac{q_2 v_2}{(L+q_1) v_1} f_1 e^{(a_1-a_2) \theta}} \end{aligned} \right. \quad (5)$$

В связи с тем, что величины параметров  $f_1$  и  $f_2$  зависят от мольных долей компонентов сплава, то можно легко показать, что температура воспламенения аэрозвеси сплава  $MeB_n$  при  $f_1 > f_1^0$  будет иметь минимум при

$$e^{(a_1-a_2) \theta} = \frac{q_2 v_2}{(L+q_1) v_1} f_1 \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \quad (6)$$

где  $\theta$  определяется из (5).

Условие (6) определяет некоторое критическое содержание элемента  $Me$  ( $\sigma_2^{kp}$ ) в сплаве, начиная с которого увеличение содержания элемента  $Me$  ухудшает условия воспламенения. Таким образом, применение элемента – добавки  $Me$  с целью облегчения воспламенения основного компонента –  $B$ , целесообразно только при  $\sigma_2 \leq \sigma_2^{kp}$ , если компоненты сплава реагируют с окислителем в кинетическом режиме.

Как видно из (5) при тепловом механизме воспламенения связь между температурой воспламенения и основным параметром  $B, \rho_{O_2}, d_0$  определяется из соотношения

$$e^{-\frac{E_i}{RT_e}} \sim \frac{1-B}{B} d_0 \frac{1}{\rho_{O_2}}$$

При  $f_2 \ll 1, f_2/f_1 \ll 1$  и  $f_1 < f_1^0$ , когда диффузионный режим реагирования сохраняется в течении всего процесса, критические условия воспламенения могут быть получены путем анализа на устойчивость стационарных решений упрощенной системы (3). Значения безразмерных параметров на пределе воспламенения определяется из совместного решения системы трансцендентных уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\Omega_{kp}}{1+A} &= \left\{ a \left( 1 + \frac{L}{q_1} \right) \omega e^{a \theta_{kp}} \left[ 1 + f_1 \frac{q_2 v_2}{(L+q_1) v_1} \left( 1 + \frac{a_2 - a_1}{a} \right) e^{(a_2 - a_1) \theta_{kp}} \right] \right\}^{-1} \\ \theta_{kp} &= \frac{1}{a} \left\{ 1 + \frac{a_1 - a_2}{a} \left[ 1 - \frac{a_1 - a_2}{a} + \frac{(L+q_1) v_1}{q_2 v_2} \cdot \frac{1}{f_1} e^{(a_1 - a_2) \theta_{kp}} \right]^{-1} \right\} \end{aligned} \right. \quad (7)$$

Отметим, что как видно из (7), значение  $\Omega_{kp}$  зависит от соотношения скоростей параллельных реакций при стационарной температуре (слагаемые типа  $f_1 e^{(a_2-a_1) \theta_{kp}}$ ), а не от их абсолютных значений в противоположность тому, что

имело место при тепловом воспламенении (слагаемые типа  $f_1 f_2$  (5)). Это связано с тем, что при тепловом воспламенении в условиях избытка окислителя параллельные реакции протекают независимо, тогда как для термокинетического воспламенения при диффузионном контроле процесса, тепловыделение от каждой реакции зависит от перераспределения окислителя между реакциями, определенного отношением скоростей параллельных стадий.

При малых значениях  $f_1$  ( $f_1 < 0,1 \div 0,2$ ) значения  $\Omega_{кр}$  слабо зависят от  $f_1$  и разности  $(a_1 - a_2)$ , что легко объясняется преимущественным окислением В сплава. Тогда критерий (7) можно упростить:

$$\frac{\Omega_{кр}}{1 + A} = \frac{1}{e\omega a \left(1 + \frac{L}{q_1}\right)}; \quad \theta_{кр} = \frac{1}{a} \quad (7a)$$

Отметим идентичность критерия (7a) с критерием, описывающим воспламенение металлов при протекании последовательных реакций II.

При больших значениях  $f_1$  ( $f_1 > 5 \div 10$ ), когда преимущественно реагирует элемент Ме сплава, критерий (7) можно упростить, пренебрегая тепловыделением от реакции образования  $B_2O_3$ :

$$\frac{\Omega_{кр}}{1 + A} = \frac{1}{e(a - a_1 + a_2)\omega f_1 \frac{q_2 v_2}{q_1 v_1}}; \quad \theta_{кр} = \frac{1}{a - a_1 + a_2} \quad (7б)$$

Для иллюстрации характера влияния параметра  $f_1$  на процесс воспламенения обратимся к Рис. 1. Из сопоставления кривых 1 и 2 видно, что с ростом  $f_1$ , уменьшается квазистационарная толщина слоя защитной окиси  $B_2O_3$  (интенсификация реакции  $Me + O_2$  приводит к снижению скорости образования  $B_2O_3$ ). Поэтому, резкое увеличение скорости диффузии окислителя через слой  $B_2O_3$ , вследствие протекания последовательной реакции, начинается при более низких температурах.

Таким образом, при  $f_1 < f_1^0$ , параллельная реакция  $Me + O_2$  оказывает сильное кинетическое влияние на протекание процесса воспламенения сплава, которое заключается в изменении скорости образования защитного слоя  $B_2O_3$ . Характер теплового влияния этой реакции зависит от соотношения величин  $(v_1 q_1)$  и  $(v_2 q_2)$ . Так, при  $v_1 q_1 < v_2 q_2$  интенсификация реакции  $Me + O_2$  приводит к росту теплового вклада более экзотермической реакции – воспламенение облегчается, а при  $v_1 q_1 > v_2 q_2$  – затрудняется. Численное интегрирование (3) при вариации отношения  $\frac{v_1 q_1}{v_2 q_2}$  в пределах от 0,2 до 5 показало, что кинетический фактор реакции окисления элемента Ме сплава преобладает (предел воспламенения уменьшается с ростом  $f_1$ , даже если  $\frac{v_1 q_1}{v_2 q_2} < 1$ ). Поскольку величина зависит как от отношения  $\frac{k_1}{k_2}$ , так и от мольного содержания элементов в сплаве  $MeB_n$ , то для конкретного сплава, увеличение содержания Ме (рост  $f_1$ )



всегда будет способствовать снижению предела воспламенения аэровзвеси частиц сплава.

Качественное поведение зависимостей  $T_g(d_0), T_g(p_{O_2})$  зависит от вида закона испарения  $V_2O_3$  и потому связь между температурой воспламенения и параметрами системы определяется из соотношения:

$$e^{-\frac{\phi}{RT_g}} \sim \frac{1-B}{B} d_0 \frac{1}{W_1'(p_{O_2}, d_0)}$$

Поскольку  $W_1' \sim \frac{1}{d_0}$ , то температура воспламенения сплава  $MeB_n$  при диффузионном режиме реагирования будет зависеть от  $d_0$  сильнее ( $e^{-\frac{\phi}{RT_g}} \sim d_0^2$ ), чем при тепловом воспламенении ( $e^{-\frac{E_i}{RT_g}} \sim d_0$ ). Зависимость температуры воспламенения от относительной массовой концентрации взвеси, аналогична полученной для теплового воспламенения.

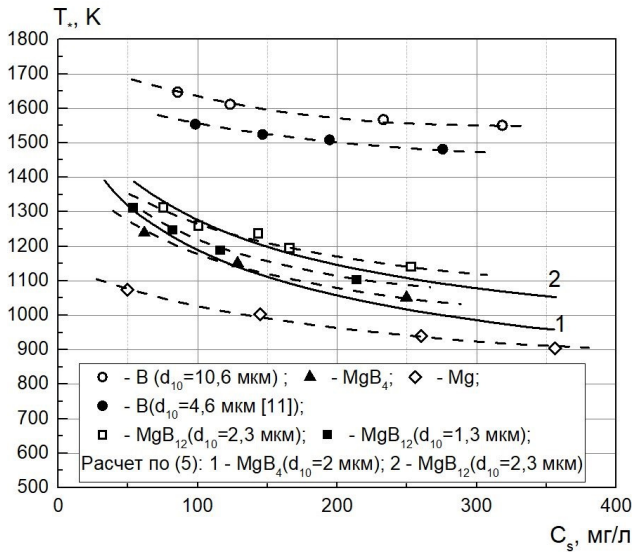
Применим полученные результаты к анализу процессов воспламенения аэровзвесей частиц сплавов  $MgB_4$  и  $TiB_2$ . Из условия  $f_1 = f_1^0$  определим, какой из двух рассмотренных механизмов воспламенения реализуется ( $f_1^0 \sim \frac{\gamma}{\omega}$ ).

**Полиборид магния.** Оценки будем проводить для двух существенно различных значений констант скорости реакции  $B+O_2$ :  $E_1=31,7$  ккал/моль [16] и  $E_1=100$  ккал/моль [17], а при реагировании  $Mg$ , следуя [18], использовано значение  $E_2=38,5$  ккал/моль. Как показывает расчет, при заданной энергии активации реагирования магния условие  $f_1 > f_1^0$  реализуется при  $T \geq 1500$  К для  $E_1=31,7$  ккал/моль, а при  $T \leq 2000$  К – для  $E_1=100$  ккал/моль. Следовательно, если стационарные разогревы таковы, что температура частиц сплава лежит внутри этого диапазона (уровень температур воспламенения  $MgB_n$   $T_g \sim 1200 \div 1300$  К), то можно считать, что в процессе предпламенного разогрева происходит смена режима реагирования от диффузионного по пленке  $V_2O_3$  к кинетическому.

Поэтому для расчет критических условий воспламенения аэровзвеси частиц  $MgB_4$  и  $MgB_{12}$  можно воспользоваться критерием (5). Остальные значения теплофизических и кинетических констант, использованных при расчетах по критерию теплового воспламенения, приведены ниже:

$$Nu = 2; \quad Nu_c = 5,5; \quad \lambda = 5,5 \cdot 10^{-5} \left( \frac{T}{273} \right)^{0,75} \frac{\text{кал}}{\text{см К с}}; \quad q_{1v1} = 6300 \text{ кал/г } O_2; \\ q_{2v2} = 980 \text{ кал/г } O_2; \quad L = -1290 \text{ кал/г}; \quad D = 1,25 \text{ см};$$

$$\xi C_{O_2}^\infty \chi(T_s, h_u) = 1,2 \cdot 10^{-6} T \frac{P_{O_2}}{h_u} e^{-\frac{22600}{T_s}};$$



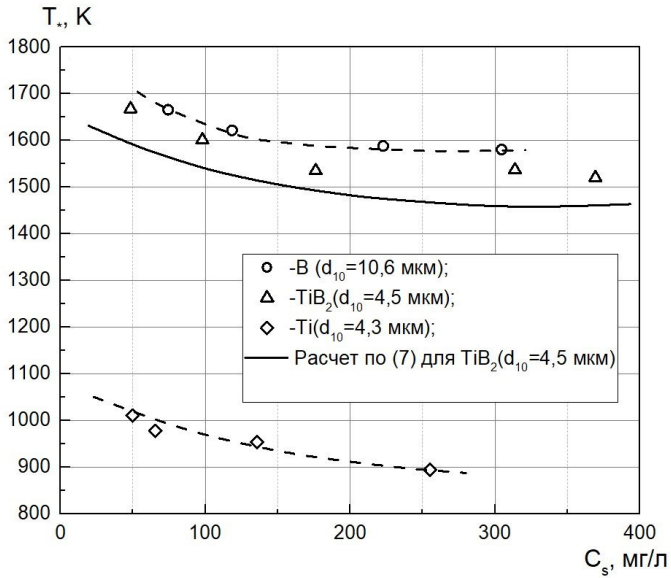
**Рис. 2.** Зависимость температуры воспламенения аэрозвеси частиц бора, полиборида магния и магния от массовой концентрации ( $P = 1 \text{ атм}$ )

$$W'_1 = \frac{1,005 \cdot 10^{10} \mu_{B_2O_3} \cdot 0,04 e^{-\frac{44000}{T_*}}}{4\pi T_*^2 \left( 1 + \frac{4,5 \cdot 10^7 \cdot 0,04 p \cdot r_0}{Nu \cdot T_*} \right)}, \left[ \frac{г}{см^2 \cdot с} \right]$$

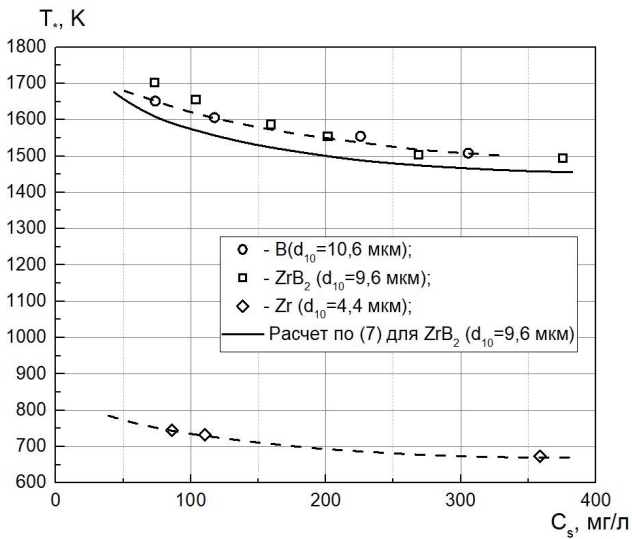
На рис. 2 кривыми 1,2 показаны зависимости  $T_*$  ( $C_s$ ), рассчитанные по критерию (5). Видно, что экспериментальные данные по воспламенению аэрозвеси частиц полиборида магния хорошо согласуются с расчетом как по характеру, так и по абсолютным величинам температур.

**Диборид титана и циркония.** Оценки, проведенные для диборида титана и циркония (по данным [21] при  $T > 1000 \text{ К}$  для титана имеет место линейный закон окисления с константой  $E_2 = 40000 \text{ кал/моль}$ , а для циркония при  $T > 1200 \text{ К}$  использованы данные работы [19]) показали, что независимо от значений энергии активации реакций  $B+O_2$  в сплаве преобладает термокинетический механизм воспламенения, т.к.  $f_1 < f_1^0$ . Этот факт также подтверждается и результатами экспериментальных исследований.

Поэтому, для количественного сопоставления результатов наших экспериментов и расчета будем использовать критерий термокинетического воспламенения (7). Результаты расчета для  $TiB_2$  и  $ZrB_2$  показаны на Рис. 3 и Рис. 4 сплошными кривыми. Как видим, результаты расчета и эксперимента хорошо согласуются. На этих рисунках приведены для сравнения экспериментальные данные для исходных металлов.



**Рис. 3.** Зависимость температуры воспламенения аэрозвесей частиц бора, диборида титана и титана от массовой концентрации ( $P = 1$  атм)



**Рис. 4.** Зависимость температуры воспламенения аэрозвесей частиц бора, диборида циркония и циркония от массовой концентрации ( $P = 1$  атм)

**Выводы.** В рамках разработанной модели воспламенения проанализировано взаимное влияние параллельных реакций окисления компонентов соединения и последовательных реакций образования и удаление борного ангидрида. Показано, что в зависимости от значений, определяющих процесс параметров, воспламенение в такой системе может происходить: либо как следствие срыва теплового равновесия – теплокинетический режим, когда скорости параллельных реакций контролируются их кинетикой или в условиях преимущественного окисления компонента соединения, когда пленка защитной окиси  $B_2O_3$  не накапливается в процессе реагирования; либо в результате взаимодействия теплового и кинетического самоускорений, когда резкое увеличение температуры системы совпадает с удалением защитной окалины  $B_2O_3$  вследствие ее испарения – термокинетический режим.

Получены соотношения для расчета пределов воспламенения и введена условная граница смены преобладающих механизмов воспламенения.

На примере анализа экспериментальных данных по воспламенению взвесей  $MgB_n$ ,  $TiB_2$  и  $ZrB_2$  с помощью развитого подхода последовательно-параллельных реакций показана его перспективность при описании процессов воспламенения борсодержащих соединений.

#### Литература:

1. *Mačević A., Semple J.M.* Combustion of boron particles at atmospheric pressure // *Combustion Science and Technology*. – 1969. – Vol. 1, №3. – P. 181-191.
2. *Mačević A., Semple J.M.* Combustion of boron particles at elevated pressures // *Symposium (International) on Combustion*. – 1971. – Vol. 13, № 1. – P. 859-868.
3. *VovchukYa. I., Zolotko A. N., Klyachko L. A., Polishchuk D. I., Shevchuk V. G.* Gasification of boron oxide // *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 1974. – Vol. 10, №4. – P. 538-540.
4. *Dreizin E.L., Keil D.G., Felder W., Vicenzi E.P.* Phase changes in boron ignition and combustion // *Combustion and Flame*. – 1999. – Vol. 119, № 3. – P. 272-290.
5. *Золотко А.Н., Мацко А.М., Полищук Д.И., Буйновский С.Н., Гапоненко Л.А.* Воспламенение двухкомпонентной газовой взвеси частиц металлов // *Физика горения и взрыва*. – 1980. – Т. 1. – С. 23-26.
6. *Розенбанд В., Гани А.* Синтез порошка диборида магния в режиме теплового взрыва // *Физика горения и взрыва*. – 2014. – Т.50, №6. – С. 34-39.
7. *Ягодников Д. А., Воронецкий А. В., Девятуха Д. Ю. и др.* Исследование процессов горения и рентгенофазный анализ продуктов сгорания пиротехнических составов на основе нано- и ультрадисперсного диборида алюминия // *Материалы XIV симпозиума по горению и взрыву*. – Черноголовка, 2008. – С. 202.
8. *Ягодников Д. А.* Воспламенение и горение порошкообразных металлов. – М.: издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. – 432 с.

9. *Золотко А.Н., Клячко Л.А.* Критические условия в гетерогенных системах с параллельными реакциями // *Физика горения и взрыва.* – 1979. – Т.15, №3. – С. 3-10.

10. *Золотко А.Н., Киро С.А. Вовчук Я. И.* Воспламенение частиц карбида бора в сухих кислородсодержащих средах // *Физика горения и взрыва.* – 1981. – Т.17, №6. – С. 3-10.

11. *Золотко А.Н., Клячко Л.А., Копейка К.М., Шевчук В.Г.* Критические условия воспламенения газозвеси частиц бора // *Физика горения и взрыва.* – 1977. – №1. – С. 38-44.

12. *Блошенко В.Н.* Теоретические исследования воспламенения частиц и капель горючего в газообразном окислителе // Автореф. дисс. к.ф.-м.н. – Черноголовка. – 1973. – С. 19.

13. *Самсонов Г.В., Серебрякова Т.И., Неронов В.А.* Бориды. – М.: Атомиздат, 1975.

14. *Григорьев Ю. М., Сафанеев Д. З.* К теории воспламенения металлов, обладающих летучими пленками продуктов // *Физика горения и взрыва.* – 1980. – Т.16, №2. – С. 19-25.

15. *Золотко А.Н., Вовчук Я.И.* Воспламенение дисперсных гетерогенных систем с последовательными реакциями // *Физика горения и взрыва.* – 1983. – Т.19, №2. – С. 10-17.

16. *Хайкин Б.И., Блошенко В.Н., Мержанов А.Г.* О воспламенении частиц металлов // *Физика горения и взрыва.* – 1983. – Т.5, №4. – С. 474-488.

17. *Золотко А.Н., Мацко А.М., Полищук Д.И., Буйновский С.Н., Гапоненко Л.А.* Воспламенение двухкомпонентной газозвеси частиц металлов // *Физика горения и взрыва.* – 1980. – Т. 1. – С. 23-26.

18. *Золотарь Е.А., Озеров Е.С.* К расчету предела воспламенения частицы бора // *Физика горения и взрыва.* – 1973. – Т.9, №4. – С. 515-521.

19. *Иоффе В.Г.* Воспламеняемость порошков циркония и его сплавов во взвешенном состоянии // *Порошковая металлургия.* – 1968. – №3. – С. 100-104.

20. *Cassel H.M., Liebman I.* Combustion of magnesium particles II—Ignition temperatures and thermal conductivities of ambient atmospheres // *Combustion and Flame.* – 1963. – Vol. 7. – P. 79-81.

21. *Кофстад П.* Высокотемпературное окисление металлов. М.: Мир, 1969. – 329 с.

**Буланін П.К., Сидоров О.Є., Кіро С.А., Полетаєв М.І., Шевчук В.Г.**  
**Критичні умови спалахування газозависів енергоємних сполук**

Анотація

*Бор є перспективною речовиною в якості енергоємної добавки до ракетних палив, однак маючи високу температуру займання може бути використаний у складі з'єднань з металами - боридами. Реалізація потенційних можливостей боридов металів, можлива в умовах, що забезпечують їх займання. У даній роботі були проведені теоретичні дослідження процесу займання боридів  $MgBn$ ,  $TiB_2$  і  $ZrB_2$ , на підставі моделі для гетерогенних систем з паралельними реакціями. Аналіз показав, що займання може відбуватися у теплокінетичному, або в термокінетичному режимах. Отримано співвідношення для розрахунку меж займання і введена умовна межа зміни переважних механізмів запалення.*

**Bulanin Ph., Sidorov A., Kiro S., Poletaev N., Shevchuk V.**  
**Critical conditions of energy intense compounds aerosuspensions ignition**

Summary

*Boron is a promising material for the use as an energy-intensive additive to rocket fuels. However, due to the high ignition temperature, it can be used in the composition of compounds with metal - borides. The realization of the potential of borides of metals is possible under conditions that ensure their ignition. In this work, theoretical studies of the ignition process of borides  $MgBn$ ,  $TiB_2$  and  $ZrB_2$  were performed based on the model for heterogeneous systems with parallel reactions. The analysis showed that ignition can be performed in heat-kinetic, or in thermo-kinetic mode. The relations for calculating the limits of ignition are obtained and the concept of the conditional boundary of the change of the prevailing ignition mechanisms is introduced.*

## ГАЗОДИНАМІКА

УДК 539.328

*Buyadzhii V. V., Sofronkov A. N., Glushkov A. V.,  
Khetselius O. Yu., Dubrovskaya Yu. V., Svinarenko A. A.*

*Odessa State Environmental University  
E-mail: buyadzhiiv@gmail.com, a\_sofronkov@ukr.net*

### **New energy, angle momentum and entropy balance approach to modelling climate and macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass transfer at macroscale. I. General Formalism**

*We present elements of a new non-stationary balance approach to modelling global mechanisms of climate and macro turbulent atmospheric low-frequency processes, including processes of heat-mass transfer at spatial and temporal macro scales, teleconnection effects etc. The main forming factor is a triplet of interacting solitons: "the planetary soliton of Hadley cells - the entire complex of atmospheric fronts - the Rossby soliton wave packet". The approach is based on the using balance relationships for entropy, energy and angular momentum, spectral theory of atmospheric macroturbulence, atmospheric moisture flow in further connection with the continuity of atmospheric circulation forms (teleconnection, genesis of fronts). Particular application is studying a spatial-temporal picture of the long-term atmospheric pollutants (including distribution of radionuclides after accidents at the nuclear power plant like Fukushima etc) in the atmosphere with accounting for the macro turbulent, circulation low-frequency processes.*

**Introduction.** Understanding and quantitative description of global mechanisms in atmospheric low-frequency processes, teleconnection effects etc attracts a fundamental interest in a modern physics of climate and heat-and mass transfer in complex atmospheric system " [1-20]. It should be noted that at present time there are different, quite consistent approaches to modelling global atmospheric macroprocesses and respectively the methods of modelling temporal and spatial dispersion of different pollutants in atmosphere and other geospheres (look for example, [21-30]). One should mention such methods as MLDP0 (Modèle Lagrangien de Dispersion de Particules d'ordre 0), HYSPLIT (Hybrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model), NAME (Numerical Atmospheric-dispersion Modelling Environment), RATM (Regional Atmospheric Transport Model), FLEXPART (Lagrangian Particle Dispersion Model), model of the European Center for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF) and others [7,11,26,30]. Nevertheless, correct quantitative description of the global atmospheric processes, the heat-and mass transfer processes in an atmosphere, macromodelling dispersion of the pollutants in an atmosphere remains very actual and hitherto unsolved problem. Below we present the elements of a new approach, which is based on the entropy, energy, moment balance relationships for the global atmospheric low-frequency processes, theory of atmospheric macrotur-

bulence and circulation over the position of the front sections. The fundamental idea is that the main process-forming factor is a triplet of interacting solitons: "the planetary soliton of Hadley cells - the entire complex of atmospheric fronts - the Rossby soliton wave packet" [22-24].

**Advanced balance approach to macroatmospheric processes and a triplet of the interacting Hadley cells – Rossby – atmospheric fronts solitons.** Nowadays it has become preferable to use single-factor models for the diagnosis and prediction of the atmospheric macrocirculation. However, these models do not reveal a dynamics of the process, but are only a summary statement of the state. For example, the forecast of climate changes in these models can only be done by studying trends in heat balance maps. In our opinion, the "heat balance" should be replaced by the "entropy indicator" of the climate state. This index satisfies the equation of the entropy balance. Moreover, it contains a time derivative, which does not exist in the heat balance equation. The problem is only that the entropy balance is calculated in the low-frequency range of climate change. Such a low-frequency range can only be in planetary-scale processes that form global climate change. It is well known [1, 22, 23] that such processes include wave oscillations such as the planetary soliton - the Hadley cells. These cells attract a great interest. For example, the only so far discovered process with a two-year cycle is the "southern process with El Niño", which is deciphered on the Hadley cells. The change in the state of the Hadley cells on a global scale will be the basis for saturation of the entropy balance equation, the minimum of which should be expected at the characteristic middle of the stage of the climatic epoch. A change in the energy of a soliton can occur if a moment of its destruction appears at low-frequency interaction with another, long-existing wave process, also of the soliton type. As a result of this interaction, a third soliton must arise. The second and third solitons are known: the Rossby solitons (blocks emerging from the tropical belt), which basically determine the nature of the atmosphere's circulation and the corresponding weather complex, and the soliton of the atmospheric fronts[22]. On the fronts, up to 30% of the solar energy is realized in the processes of wet convection to an effect of the atmospheric moisture flow. The thermodynamic front solenoids are so energy-saturated that they are a natural barrier to energy dissipation into mesoprocesses, the horizontal scale of which is much smaller than the transverse dimension of the front. Moreover, the transfer of energy from the mesoprocesses of the surface layer to the side of larger waves by the mechanism of "negative viscosity" is not carried out through the front. It explains that the main climate-forming (or global macro circulation) factor is a triplet of the solitons: "the planetary soliton of Hadley cells - the whole complex of atmospheric fronts - the Rossby soliton wave packet". The entropy balance equation should calculate the balance in the complex of the soliton triplet without mutual energy exchange (the active phase of the climatic stage), whereas the increasing entropy corresponds to a mutual energy exchange between the elements of the soliton triplet. All three elements of the soliton triplet determine the dynamic change in the complex of weather, while the factors that form the heat balance (radiation and heat fluxes) are basically subject to the annual course of insolation and do not form low-frequency processes of a climate-like



dynamics. The triplet of these solitons can be parametrized by means of the following model.

We assume that each of these solitons can be analytically determined by solving the known Karteweg-de Vries equation:

$$V_t - 6V^2V_x + V_{xxx} = 0. \quad (1)$$

Here  $V$  is the velocity, the subscripts mean the derivative with respect to the corresponding coordinate. The asymptotic solution (1) for time  $t \rightarrow \infty$  has the form:

$$V(x, t) = (3t)^{-1/3} r(0) \text{Ai}(Z) - (3t)^{-2/3} i \frac{r'(0)}{2} \text{Ai}'(Z) + O\left(\frac{1}{3t}\right), \quad (2)$$

where  $Z = x(3t)^{-1/3}$ ;  $r$  – generalized parameter of the soliton wave radiation matrix;  $\text{Ai}(Z)$  – Airy function. The solution of Eq.(2) can be represented in the low-frequency range in the vicinity of  $x = 0$  as a series of  $Z$ . The soliton of Hadley cells, forming a circumpolar vortex, occupies an area comparable to the hemisphere of the Earth; the Rossby soliton occupies a space of an order of magnitude smaller, while the transverse dimension of the front soliton is only about 30 km. The Rossby soliton is manifested as a result of the low energy transfer of the nonlinear interaction of these two solitons. In view of the apparent incomparability of the geometric area dimensions of these solitons, it becomes necessary to replace the coordinate of the space ( $x$ ) by the energy coordinate ( $E$ ). In this coordinate, all three solitons are comparable. The  $E$ -coordinate is formed on the basis of spectral modes of  $N$ -soliton solutions. The  $N$ -soliton solution has the following structure for the Karteweg-de Vries equation:

$$\psi_N = \sum_{\mu=0,1} \exp\left(\sum_i \mu_i \left(\eta_i + i \frac{\pi}{2}\right) + \sum_{i \leq 1 \leq j} \mu_i \mu_j A_{ij}\right), \quad (3)$$

where  $\eta_i = k_i Z - k_i^3 t$  – wave vector in coordinate ( $Z, t$ );  $\mu_i, \mu_j$  – weight coefficients of particular solutions of the kink and antikink type;  $A_{ij}$  – matrix of a soliton nonlinear wave radiation:

$$\mathbf{e}^{A_{ij}} = \left(\frac{k_i - k_j}{k_i + k_j}\right)^2. \quad (4)$$

Operator  $\sum_{i \leq 1 \leq j} \mu_i \mu_j A_{ij}$  in the solution (4) determines the energy transformation

from the spectrum of  $N$ -solutions with radiation, i.e. transfer of the wave energy between the solitons. The construction (2) - (4) is to be introduced into the equation of the entropy balance:

$$\rho \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{\vec{J}_q}{T} = \frac{|P| \cdot \vec{Y}}{T} + \frac{\vec{J}_q \cdot \vec{X}_q}{T}, \quad (5)$$

where  $\rho$  – is the substantial density of the medium through which the entropy flux  $S$  is carried out;  $\vec{J}_q$  – the entropy flux vector;  $T$  is the temperature of the weighted average convection condition in the frontal systems, consistent with the Hadley cells;  $\vec{X}_q = \nabla T$  – entropy productivity;  $\vec{Y}_q = \nabla x \vec{V} + 2\vec{\omega}$  – an absolute vortex;  $|P|$  – antisymmetric deformation tensor in space. Note that the third term in equation (5) spe-

cifies the irreversible course of the process in time.

Equation (5) must be rewritten for the coordinate  $E$ , i.e. it must correspond to the Riemannian geometry of the  $N$ -dimensional phase space of the spectral modes of  $N$ -soliton solutions. The soliton of the Hadley cells and the front soliton describe the curvature of the Riemannian space in the form of axial vectors, whereas the Rossby soliton contains mainly polar vectors. As is known, the tensor products of a tensor on axial vectors by a tensor on polar vectors give, as a result, the tensor of polar vectors. This means that the Rossby soliton, selecting the wave energy of the planetary soliton of the circumpolar vortex and the soliton of the fronts, gradually destroys them, translating them into a soliton of polar vectors. But the soliton of the front has a constant energy supply from wet convection and after its regeneration on the Rossby waves restores the structure of the planetary soliton. The cycles of such regeneration serve as the basis for low-frequency oscillations in the macroprocesses (climate) forecast and substantially exceed the periods of the frequency sweep of the solution (1). The long-period oscillation cycles of the tensor density arise in the Riemannian space time, as the energy losses generated by the wave radiation from the planetary soliton to the Rossby waves are compensated by the frontal soliton at the expense of the energy of the hydrologic cycle carried out in it. The curvature of the Riemannian space must also ensure the irreversibility in time of the tensor  $|P|$  in equation (5). The friction losses are removed by the same mechanism. The form of the metric tensor of the Riemannian space for this problem was published in [22]. The Rossby solitons exist relatively a little time to be important for climate prediction. However, the fact of the repeated existence of blocking processes during the year ensures the existence of a total time interval sufficient for a significant increase in the field of the tensor density. This will be the time period that gives the necessary frequency in the task of forecasting the macroatmospheric processes. Two main solitons give wave energy to either Rossby solitons or progressive waves of temperate latitudes. But waves of temperate latitudes have a tensor analogy in axial vectors and therefore can not affect either the planetary soliton or the fronts. The energy costs for wave radiation in their direction are compensated by the latent energy of the phase transitions in the solitons of the fronts. The energy of the fronts cannot cause an energy overflow of the planetary soliton or solitons and the Rossby waves, as a process is limited by the solar constant. This nonlinear oscillatory process is stable in time and can exist long enough in time and commensurate with the time interval of climatic stage. The initial conditions in the sense of the Cauchy problem do not exist, because the system of solitons must enter a steady oscillatory regime over a long time interval of prehistory.

**Advanced angle momentum balance approach and spectral analogue of atmosphere dynamics equations in a low-frequency range.** As some elements of our theory were in details presented earlier [23-25], we are limited only by the key aspects. An advanced non-stationary angular momentum balance equation of in the planetary dynamic movements of air masses is written in the following standard integral form [24]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \rho M dV &= \int_{\phi_1}^{\phi_2} \int_0^H \int_0^{2\pi} \rho v M d\phi dz d\lambda + \int_0^H \int_{\phi_1}^{\phi_2} \int_0^{2\pi} (p_E^i - p_W^i) a \cos \phi dz d\phi d\lambda + \\ &+ \int_{\phi_1}^{\phi_2} \int_0^{2\pi} \int_0^H \tau_0 a \cos \phi d\phi d\lambda 2\pi, \end{aligned} \quad (6)$$

where  $M = \Omega a^2 \cos \varphi + u a \cos \varphi$  – angular momentum;  $\Omega$  – the angular velocity of rotation of the Earth;  $a$  – radius of the Earth;  $\varphi$  – Latitude ( $\varphi_1 - \varphi_2$  – separated latitudinal belt between the Arctic and polar fronts);  $\lambda$  – longitude;  $u, v$  – zonal and meridional components of the wind velocity;  $\rho$  – air density;  $V$  – the entire volume of the atmosphere in this latitude belt from sea level to the average height of the elevated troposphere waveguide -  $H$  (in notations [1]  $H = \infty$ );  $p_E^i - p_W^i$  – the pressure difference between the eastern and western slopes of the  $i$ -th mountains;  $z$  – height above sea level;  $\tau_0$  – the shear stress on the surface. From the point of view of physics, the cycle of balance of angular momentum in the contact zones with the hydrosphere and lithosphere becomes a singularity. This singularity can be detected through the occurrence of zones of fronts and soliton-type front. Then the kernel of equation (1) can be defined in the density functional ensemble of complex velocity potential [23, 24]

$$f = \overline{v_\infty} z + \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^n q_k \ln(z - a_k) + \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^p \frac{M_k e^{i\alpha_k}}{z - c_k} - \frac{i}{2\pi} \sum_{k=1}^m \Gamma_k \ln(z - b_k) \quad (7)$$

and the complex velocity, respectively, will be

$$v = U + iV = \frac{df}{dz} = \overline{v_\infty} + \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^n \frac{q_k}{z - a_k} - \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^p \frac{M_k e^{i\alpha_k}}{(z - c_k)^2} - \frac{i}{2\pi} \sum_{k=1}^m \Gamma_k / (z - b_k), \quad (8)$$

where  $w$  – complex potential;  $v_\infty$  – complex velocity general circulation background (mainly zonal circulation);  $b_k$  – coordinates of vortex sources in the area of singularity;  $c_k$  – coordinates of the dipoles in the area of singularity;  $a_k$  – coordinates of the vortex points in areas of singularity;  $M_k$  – values of momenta of these dipoles;  $\alpha_k$  – orientation of the axes of the dipoles;  $\Gamma_k, q_k$  – values of circulation in the vortex sources and vortex points, respectively.

Further we consider an advanced spectral analogue for equation of motion for dynamics of the atmosphere in the low frequency range [22-24]. Note that the macro-turbulent atmosphere equations are low-frequency ones in its basis and there is a lot of experience of their solving by spectral methods (see [27-29]). The method for calculating a turbulence spectra should be based on the standard tensor equations of turbulent tensions. One could write the system of equations for the Reynolds tensions, moments of connection of the velocity pulsations with entropy ones and the corresponding closure equations [23, 24]. The technique of using Reynolds tension tensors of the second rank is well known (for example, in the form of an analytical representation). The master equations (velocity  $x$ -,  $y$ -components  $U, V$ ) with accounting the Coriolis force can be rewritten as (look [24]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial V'^2}{\partial t} = & -\frac{i}{a} \left[ \overline{V'^2 L_1(\bar{V})} + 2\overline{V'V' L_1(V')} + \overline{V'^2 L_1(V')} \right] - \\ & -\frac{i}{a} \left[ L_2(\bar{V}) \overline{V'U'} + \overline{V'U' L_2(V')} + \overline{U'V' L_2(V')} + \overline{V'U' L_2(V')} \right] + \\ & + 4\omega i \cos \theta \overline{V'^2} + \frac{2i}{a} \overline{V' L_6(\Phi')}, \end{aligned} \quad (9a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U'^2}{\partial t} = & -\frac{i}{a} \left[ \overline{V'U' L_3(\bar{U})} + \overline{V'U' L_3(U')} + \overline{U'V' L_3(U')} + \overline{V'U' L_3(U')} \right] - \\ & -\frac{i}{a} \left[ \overline{U'^2 L_4(\bar{U})} + 2\overline{U'U' L_4(U')} + \overline{U'^2 L_4(U')} \right] - 4\omega i \cos \theta \overline{U'^2} + \frac{2i}{a} \overline{U' L_5(\Phi')}, \end{aligned} \quad (9b)$$

where, as usually:

$$L_j = \frac{\partial(\dots)}{\partial \theta} - (-1)^j \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial(\dots)}{\partial \lambda} + b_j \operatorname{ctg} \theta(\dots), \quad b_j=1, j=1,4; b_j=-1, j=2,3; b_j=0, j=5,6.$$

The simplified modelling supposes remaining only two operators, say, in the equation (9c):  $\frac{\partial V'U'}{\partial t} = \frac{i}{a} \overline{V' L_6(\Phi')}$  expressing  $\Phi'$  through  $\phi$  complex potential of the velocity  $f$ , and the velocity components  $U, V$  – in terms of functions  $\psi$  of the same velocity potential. The important parameter of the turbulent processes is the kinetic energy of turbulent vortices  $b^2 = \overline{u'_k u'_k}$ , which can be found from the equation (with physical explanations of any term):

$$\frac{\partial b}{\partial t} + \frac{\partial u_k b^2}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{u'_k u'_i u'_j} + 2\overline{u'_k p'} \right) = -2\overline{u'_k u'_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - 2 \frac{g}{\theta_0} \overline{w' \theta'}. \quad (10)$$

Advec- tion	Turbulent diffusion	Effect of forces of ten- sion	Interaction of Reynolds tension and averaged mo- tion	Generation for ac- count for swimming forces
----------------	------------------------	----------------------------------	--	--

Here  $g$  is the magnitude of the acceleration vector due to the planet's gravity,  $\theta_0$  is the equilibrium potential temperature,  $\theta', p'$  are departures from equilibrium values. The equations for the velocity's correlates are in details listed in [23,24]. Components of tensor of the turbulent tensions are (spectral modes of velocity field):

$$\hat{V}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{s=-k}^k V_{k,s} T_{1,s}^k \left( \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{j=-q}^q V_{q,j} T_{1,j}^q \right) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{s=-k}^k \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{j=-q}^q V_{k,s} V_{q,j} \times \sum_{v=|k-q|}^{k+q} \sigma_{1,1,2}^{k,q,v} \sigma_{s,j,s+j}^{k,q,v} T_{2,s+j}^v = \overline{v'_1 v'_1} = b^2 \quad (11)$$

Equating the velocity components determined in the global circulation model and model (6), one could find spectral matching between the wave numbers that define the functional elements in the Fourier-Bessel series with the source element of a plane field theory. It provides principally new basis for the macrocirculation atmospheric processes description. Such an approach is a key block in the balance approach to modelling global mechanisms of macro turbulent atmospheric low-frequency processes etc. In the next paper we will present the concrete simplified scheme to calculating the balance of an energy and angular momentum, atmospheric macrotribu-

lence with elements of a chaos, atmospheric moisture flow in connection with the continuity of atmospheric circulation forms.

### References:

1. *Peixoto J.P., Oort A.H.* Physics of Climate – N.-Y.: AIP, 1992. – 520p.
2. *Matveev V.* Physics of Atmosphere.-Moscow:Nauka, 1982.
3. *Glansdorff P. and Prigogine I.* Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations- New York, John Wiley Sons. – 1971.
4. *Iribarne J. V., Cho H. R.,* Atmospheric Physics.-N.-Y., Reidel Pub.Co., 1980.
5. *Ghil M., Kimoto M., Neelin J.D.* Nonlinear dynamics and predictability in the atmospheric sciences//Rev.Geophys. – 1991. – Vol.29. – P.46–55.
6. *Wang C.* ENSO, climate variability, and the Walker and Hadley circulations// In: The Hadley Circulation: Present, Past, and Future.- Eds Diaz H.F. and Bradley R.S.-Berlin: Springer. – 2004. – P.131-164.
7. *Khetselius O.Yu.,* Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction method// Dynamical Systems – Theory and Applications, Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J, Mrozowski. – 2013. – Vol.1. –P.145-152.
8. *Kurbatskii A. F.* Computational modeling of the turbulent penetrative convection above the urban heat island in stably stratified environment // Journal of Applied Meteorology. 2001. – V. 40. – P.1748 -1761.
9. *Lu J., Araya S.P., Snyder W.H., Jr. Lawson R.E.* A Laboratory Study of the Urban Heat Island in a Calm and Stably Stratified Environment. Part I: Temperature Field; Part II: Velocity Field // Journal of Applied Meteorology. – 1997. – V.36. – P.1377-1402.
10. *Brandstater A., Swinney H.* Strange attractors in weakly turbulent Couette-Taylor flow//Phys. Rev. A. – 1987. – Vol. 35. – P. 2207–2220.
11. *Gubanova E., Glushkov A., Khetselius O., Bunyakova Yu., Buyadzhi V., Pavlenko E.,* New methods in analysis and project management of environmental activity: Electronic and radioactive waste.– Kharkiv: FOP.-2017. – 120P.
12. *Wittman, M. A. H., Charlton, A. J. and Polvani, L. M.* On the meridional structure of annular modes// J. Climate. – 2005. – Vol. 18. – P.2119-2122.
13. *Voss R. and Mikolajewicz U.* Long-term climate changes due to increased CO<sub>2</sub> concentration in the coupled atmosphere-ocean general circulation model ECHAM3/LSG// Climate Dynamics. – 2001. –Vol.17. – P.45–60
14. *Kang I., Lau K.* Principal modes of atmospheric circulation anomalies associated with global angular momentum fluctuations//J.Atm.Sci. – 1994. – Vol.51. – P.1194.
15. *Wang, C.* ENSO, climate variability, and the Walker and Hadley circulations. The Hadley Circulation: Present, Past, and Future (Springer). – 2004.
16. *Boer G.J., Sargent N.E.* Vertically integrated budgets of mass and energy for the globe // J. Atmos. Sci. – 1985. – Vol. 42. – P.1592-1613.
17. *Trenberth K.E., Stepaniak D.P., Caron J.M.* Interannual variations in the atmospheric heat budget // J. Geophys. Res. – 2002. – Vol.107. – P.4.1-4.15.

18. *Fyfe J., Boer G., Flato G.* Predictable winter climate in the North Atlantic sector during 1997–1999 ENSO cycle// *Geophys.Res.Lett.* – 1999. – Vol.26. – P.1601-1604
19. *Arakava A., Shubert W.H.* Interaction of cumulus cloud ensemble with the large-scale environment//*Journ. of Atm. Sci.* – 1974. – Vol.31. – P.674-701.
20. *Khokhlov V.N., Glushkov A.V., Tsenenko I.A.* Atmospheric teleconnection patterns and eddy kinetic energy content: wavelet analysis// *Nonlinear Proc. in Geophys.* – 2004. – Vol.11. – P.295-301.
21. *Rusov V.D., Glushkov A.V., Vaschenko V.N., Myhalus O.T., Bondartchuk Yu.A., Smolyar V.P., Linnik E.P., Mavrodiiev S.C., Vachev B.I.* Galactic cosmic rays – clouds effect and bifurcation model of the Earth global climate. Part 1. Theory // *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Phys.* – 2010. – Vol.72. – P.498-508.
22. *Glushkov A.V., Efimov V.A., Kivganov A.F.* Modelling climate as a problem of interaction of the solitons triplete//*Meteorology, Climatology and Hydrology.* – 1999. – Issue 38. – P.3-8.
23. *Glushkov A.V.* Renorm-group and fractal approach to turbulence spectrum in planetary atmosphere system, “cosmic plasma – galactic cosmic rays”//*Ukrainian Hydrometeorology Journal* – 2013. – №12. – P.25-30.
24. *Glushkov A., Khetselius O., Ambrosov S., Bunyakova Yu., Mansarliysky V.* The use of microsystems technology "Geomath" to modeling the balance of the angular momentum of the Earth, atmospheric processes and parameters of radio waveguides: III. Nonstationary theory//*Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* – 2013. – Vol.10, №1. – P.22-28.
25. *Glushkov A., Safranov T., Khetselius O., Ignatenko A., Buyadzi V., Svinarenko A.* Analysis and forecast of the environmental radioactivity dynamics based on methods of chaos theory: General conceptions//*Environm. Problems.* – 2016. – Vol.1, №2. – P.115-120.
26. *Glushkov A.V., Buyadzi V.V., Ponomarenko E.L.* Geometry of Chaos: Advanced approach to treating chaotic dynamics in some nature systems// *Proc. Intern. Geom. Center.* – 2014. – Vol.7(1). – P.24-30.
27. *Glushkov A.V.* *Relativistic Quantum Theory. Quantum mechanics of Atomic Systems.* – Odessa: Astroprint, 2008.
28. *Khetselius O.Yu.* *Hyperfine structure of atomic spectra.* – Odessa: Astroprint, 2008.
29. *Malinovskaya S V, Glushkov A V, Khetselius O Yu, Svinarenko A A, Mischenko E.V., Florko T.A.* Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas//*Int. Journ.of Quantum Chemistry.* – 2009. – Vol.109, Issue 14. – P.3325-3329.
30. *Korsakissok I., Mathieu A., Didier D.* Atmospheric dispersion and ground deposition induced by the Fukushima Nuclear Power Plant accident: A local-scale simulation and sensitivity study// *Atm.Env.* – 2013. – Vol.70. – P.267-279

**Будджи В.В., Софронков О.Н., Глушков О.В.,  
Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Свиначенко А.А.**

**Новый балансовый по энтропии, энергии и кутовому моменту подход до моделирования климата та макротурбулентной динамики атмосферы, тепло-массо-переносу в макромасштабе. I. Загальний формалізм**

**АНОТАЦІЯ**

*Представлені елементи нового балансового підходу до моделювання глобальних механізмів кліматичних і макротурбулентних атмосферних низькочастотних процесів, у т.ч., процесів тепло-масо-переносу, ефектів телеконекції тощо. Основним процес-формулюючим фактором є взаємодія триплету солітонів: «планетарний солітон осередків Гадля – комплекс атмосферних фронтів – хвильової пакет солітонів Россбі». Підхід заснований на використанні балансових співвідношень по ентропії, енергії і кутового моменту, спектральній теорії атмосферної макротурбулентності і вологообороту у зв'язку із наступністю форм атмосферної циркуляції (телеконекція, генезис фронтів). Одним із застосувань підходу є моделювання просторово-часових полів дисперсії забруднювачів (напр., хімічних забруднювачів типу з'єднань з галогенами, радіонуклідів після аварій на АЕС типу Фукусіми і т.і.) в атмосфері з урахуванням макротурбулентних циркуляційних низькочастотних процесів.*

**Будджи В.В., Софронков А.Н., Глушков А.В., Хецелиус О.Ю.,  
Дубровская Ю.В., Свиначенко А.А.**

**Новый балансовый по энтропии, энергии и угловому моменту подход к моделированию климата и макротурбулентной динамики атмосферы, тепло-массо-переноса в макромасштабе. I. Общий формализм**

**АННОТАЦИЯ**

*Представлены элементы нового балансового подхода к моделированию глобальных механизмов климатических и макротурбулентных атмосферных низкочастотных процессов, в т.ч., процессов тепло-массо-переноса, эффектов телеконекции и др. Основным процесс-формирующим фактором является взаимодействие триплет солитонов: «планетарный солитон ячеек Гадля – весь комплекс атмосферных фронтов – волновой пакет солитонов Россби». Подход основан на использовании балансовых соотношений для энтропии, энергии и углового момента, спектральной теории атмосферной макротурбулентности и влагооборота в связи с преобладанием форм атмосферной циркуляции (телеконекция, генезис фронтов). Одно из применений подхода включает моделирование пространственно-временных полей дисперсии загрязнителей (напр., загрязнителей типа соединений галогенов, радионуклидов после аварий на АЭС типа Фукусимы и т.д.) в атмосфере с учетом макротурбулентных циркуляционных низкочастотных процессов.*

**Sofronkov A. N., Khetselius O. Yu., Glushkov A. V.,  
Buyadzhi V. V., Romanova A. V., Ignatenko A. V.**

*Odessa State Environmental University, Odessa  
E-mail: a\_sofronkov@ukr.net, okhetsel@gmail.com*

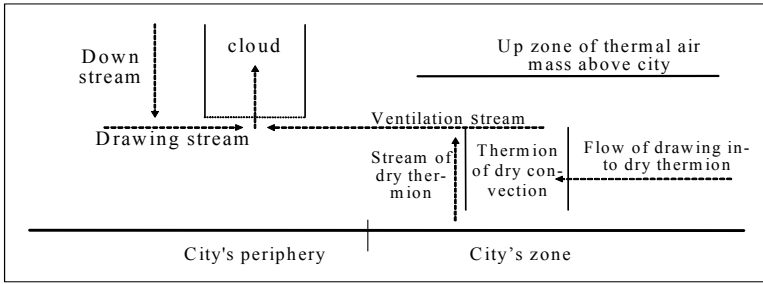
### **New geophysical complex-field approach to modelling dynamics of heat-mass-transfer and ventilation in atmosphere of the industrial region**

*New generalized approach, including an improved theory of atmospheric circulation in combination with the hydrodynamic model (with correct account of turbulence in atmosphere of the urban area) and the Arakawa-Schubert method of calculation of cloud convection and theory of complex geophysical field is applied to the simulation of heat and air transfer in atmosphere of industrial region. The modelling ventilation data (mesocirculation) parameters over territory of Odessa, as well as the area of the Fukushima power plant after 2011 accident are presented.*

**Introduction.** Studying energy-, heat-, mass-transfer in continuous environments such as atmosphere or other geospheres, remains one of the most actual, complicated and important problems of the modern physics of aerodispersed systems, atmosphere, climate and environment physics etc. The most difficult aspect of the problem is modelling processes of energy-heat, air mass- transport, dissipative and relaxation, self-cleaning, particles (for example, radioactive) deposition etc. [1-16]. At present time there is a number of different simplified models that allow to estimate the temporal and spatial structure of air ventilation in an atmosphere, and as a rule, these models are based on the laws of molecular diffusion, as well as a system of regression equations [1-5]. The most of these models have a number of disadvantages; for example, the known flare model or molecular diffusion models do not work if the atmosphere contains elements of convective instability. Moreover, the majority of the models are relatively simple and do not take into account the transience wind field, the mutual influence of the many sources of pollution etc. More sophisticated approaches such as different versions of the Lagrangian Particle Dispersion Models, model of the European Center for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF) and others [1-17] and Refs. therein) provide significantly more accurate results, however, such approaches require very complicated simulation and very correct input parameters data. Going on our studies [6,9,18-22], here we present an advanced approach to the simulation of heat and air ventilation in atmosphere of an industrial region (so called local scale atmospheric circulation complex-field (LACCF) approach). It includes an improved theory of atmospheric circulation in combination with the hydrodynamic forecast model (with quantitatively correct account of turbulence in the atmosphere at local scales) and the Arakawa-Schubert model of cloud convection.

**Mathematical modelling an atmospheric ventilation.** Our generalized approach is based on the Arakawa-Schubert model, modified to calculate the current involvement of the ensemble of clouds [3,18-22]. To calculate the involving streams





**Fig 1.** Flowchart of air mass transfer between the city and its periphery

(the real involving masses effect is created due to misbalance of vertical and down-running streams), the Arakawa-Schubert equations system for humidity and warm flow equations are solved [3,6]. Flowchart of the ventilation over the urban region territory by air flows in a presence of the cloud's convection is presented in Figure 1 and explains the key physical processes in a system.

Let us remind that the known effect of creation of the mesojets which are formed in the ventilation currents as the Couette flows. If square of a cloud base is smaller than a square of cross-section of the dry thermal top, than the ventilation current can not be appeared due to a lack of power of a cloud in the formation of the involvement meso-jets. If a square of the cloud base is substantially larger than a square of cross-section of the dry thermal top, a ventilation current captures several dry thermals, or else compensate a mass-balance current by an involvement current from the periphery of the city. A signal of the destruction of the thermal air mass over the city is the appearance of convective cloudiness over the city territory. Basically convective clouds that move to the city territory, are formed by ridges on the secondary fronts or in the lines of convective instability arising in the real synoptic processes. On top of the thermal mass of the city there is no restriction in the air exchange in the absence of a closed circulation there, "bordering" heat "hat" of the city. However, an extract of the lower layer of air from the air basin of the city should take place through a vertical convection current in a dry thermal. Indeed there is a complex picture of the anisotropic flow vortex structure over the urban region. The turbulent eddies over the urban area must be in the interaction resonant contact with the turbulent eddies of cloud-based arrays in order to obtain a successful air ventilation. In fact the currents of the front convection must coincide with currents of thermal convection of the city in the phase setting. The physical features of air ventilation predetermine the necessary modification of the well-known Arakawa-Schubert model. The model includes the budget equations for mass, moist static energy, total water content plus the equations of motion [3,6]:

$$E - D - \frac{\partial M_c}{\partial z} = 0, \quad (1a)$$

$$E \tilde{s} - D s_c - \frac{\partial M_c s_c}{\partial z} + pLc = 0, \quad (1b)$$

$$E \tilde{q} - D q_c - \frac{\partial M_c q_c}{\partial z} + p c = 0, \quad (1c)$$

where  $E$  is an inflow,  $D$  is an outflow,  $M_c = \sum p \omega_i \sigma_i = p \omega_c \sigma$  – vertical mass flow of air in the cloud;  $w_i$  is an average (on the cross-section) speed in the  $i$ -th cloud,  $c$  – horizontal cross-section square for the  $i$ -th cloud;  $\omega_c$ ,  $s_c = c_p T + gz$ ,  $q_c$  – weighted average values of vertical speed, statistical energy and the ratio of the mixture of water vapor;  $\tilde{s}$ ,  $\tilde{q}$  – average statistical energy and the ratio of the mixture of water vapor in the ambient air,  $p$  – air density;  $c$  is an amount of the condensed moisture. If  $e$  is an amount of evaporated moisture,  $L$  – specific heat of phase transitions, then the equation of heat and moisture influx will be as follows [3,6]:

$$\frac{\partial \overline{ps}}{\partial t} + v \overline{ps\bar{v}} + \frac{\partial (\overline{p\omega s})}{\partial z} + pL(c - e) - \frac{\partial (\overline{p\omega})' s'}{\partial z}, \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \overline{pq}}{\partial t} + v \overline{pq\bar{v}} + \frac{\partial (\overline{p\omega q})}{\partial z} + p(c - e) - \frac{\partial (\overline{p\omega})' q'}{\partial z}. \quad (2b)$$

The spectral representations in ensemble of clouds:

$$E(z) = \int \varepsilon(z, \lambda) m_B(\lambda) d\lambda, \quad (3a)$$

$$D(z) = \int d(z, \lambda) m_B(\lambda) d\lambda. \quad (3b)$$

If  $A$  is a work of the convective cloud then it consists of convection work and work of down falling streams in the neighbourhood of a cloud:

$$dA/dt = dA/dt_{conv} + dA/dt_{downstr}, \quad dA/dt_{downstr} = \int_0^{\lambda_{max}} m_B(\lambda') K(\lambda, \lambda') d\lambda', \quad (4)$$

Here  $\lambda$  is a speed of involvement,  $m_B(\lambda)$  is an air mass flux,  $K(\lambda, \lambda')$  is the Arakawa-Schubert integral equation kernel [3], which determines the dynamical interaction between the neighbours clouds. In the case of air ventilation emergence, mass balance equation in the convective thermals is as follows [6]:

$$m_B(\lambda) = F(\lambda) + \beta \int_0^{\lambda_{max}} m_B(\lambda') K(\lambda, \lambda') d\lambda'. \quad (5)$$

Here  $\beta$  is parameter which determines disbalance of cloud work due to the return of part of the cloud energy to the organization of a wind field in their vicinity, and balance regulating its contribution to the synoptic processes. The solution of the Eq. (2) with accounting for air stream superposition of synoptic processes can be determined by a resolvent method:

$$m_B(\lambda) = F(\lambda) + \beta \int_0^{\lambda_{max}} F(s) \Gamma(\lambda, s; \beta) ds, \quad \Gamma(\lambda, s; \beta) = \sum_{i=1}^{\infty} \beta^{i-1} \cdot K_i(\lambda, s). \quad (6)$$

The key idea [6,18-20] is to determine the resolvent as an expansion to the Laurent series in a complex plane  $\zeta$ . Its centre coincides with the centre of the city's "heating" island and the internal cycle with the city's periphery. The external cycle can be moved beyond limits of the urban recreation zone. The Laurent representation

for resolvent is provided by the standard expansion:

$$\Gamma = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (\zeta - a)^n, \quad c_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\zeta|=1} \frac{\Gamma(\zeta) d\zeta}{(\zeta - a)^{n+1}} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \Gamma(e^{it}) e^{-int} dt, \quad (7)$$

where  $a$  is center of the Laurent series convergence ring.

The method for calculating a turbulence spectra inside the urban zone should be based on solving the system of equations for the Reynolds tensions, moments of connection of the speed pulsations with entropy ones and the corresponding closure equations [19, 22]. The important parameter of the turbulent processes is the kinetic energy of turbulent vortices  $b^2 = \overline{u'_k u'_k}$ , which can be found from the equation (with physical explanations of any term):

$$\frac{\partial b}{\partial t} + \frac{\partial u_k b^2}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_k u'_i u'_j} + 2\overline{u'_k p'}) = -2\overline{u'_k u'_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - 2 \frac{g}{\theta_0} \overline{w'\theta'}. \quad (8)$$

Advection	Turbulent diffusion	Effect of forces of tension	Interaction: Reynolds tension-averaged motion	Accounting for swimming forces
-----------	---------------------	-----------------------------	---	--------------------------------

Here  $g$  is the magnitude of the acceleration vector due to the planet’s gravity,  $\theta_0$  is the equilibrium potential temperature,  $\theta'$ ,  $p'$  are departures from equilibrium values. The speed components, say,  $v_x, v_y$ , of an air flux can be determined in an approximation of “shallow water” [6]. In contrast to the standard difference methods of solution, here we use the spectral expansion algorithm [24,25]. The necessary solution, for example, for the  $v_x - iv_y$  component for the city’s heat island has the form of expansion into series on the Bessel functions.

From the other side, a air flux speed over a city’s periphery in a case of convective instability can be found by method of plane complex field theory (in analogy with the Karman vortices chain model) [6,19]:

$$v_x - iv_y = \frac{df}{d\zeta} = \frac{\Gamma}{2\pi i} \left[ \frac{1}{\zeta - \zeta_0} + \sum_{k=1}^{\infty} \left( \frac{1}{\zeta - \zeta_0 - kl} + \frac{1}{\zeta - \zeta_0 + kl} \right) \right] + \frac{d}{d\zeta} \left[ \sum_{k=1}^n \Gamma_k \ln(\zeta - b_k) \right]. \quad (9)$$

Here  $\Gamma_k$  –circulation on the vortex elements, created by clouds,  $b_k$  – co-ordinates of these elements,  $\Gamma$  – circulation on the standard Karman chain vortices of,  $l$  – distance between standard vortices of the Karman chain,  $\zeta$  – co-ordinate of the convective perturbations line (or front divider) centre,  $\zeta_0$  –  $kl$  – co-ordinate of beginning of the convective perturbation line,  $\zeta_0+kl$  – co-ordinate of end of this line. The indicated parameters are the input model ones.

Equating the speed components determined in the shallow water model and model (9), one can find spectral matching between the wave numbers that define the functional elements in the Fourier-Bessel series with the source element of a plane field theory. Let us underline that using this procedure allows significantly to simplify a solving the whole problem. It is also worth to remind that any vector field  $u$  can be separated into rotational and divergent parts, i.e.,  $u = \nabla\psi + u_\chi$  (the Helmholtz’s theorem). If the vector field is a horizontal wind, one can define a current function  $\psi$ , to express the rotational part, and a velocity potential  $\chi$ , to express the divergent part. Namely these parameters are of a great interest in applied analysis of an air ventila-

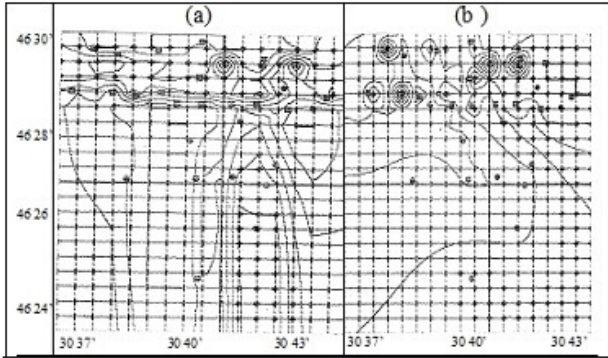


Fig. 2. (a) The potential of ventilation, (b) The current function (see text)

tion in the urban zone. Below we present the results of test computing the air ventilation parameters for some complicated synoptic situations in the Odessa city.

**Some results and conclusion.** The modelling has been fulfilled with using natural and model data on a cloudiness and convection and the “Geomath” PC code [6,18-23] has been used. The data of modelling an air flux parameters over the territory of Odessa (model synoptic situation), as well as the area of the Fukushima power plant after accident are presented. The corresponding model situation on cloudiness is absolutely real. Basically, it was assumed that the clouds (designed as black squares) run from the sea by two lines of convective disturbances and penetrate deep into the Gulf of Odessa. The distance between the convective clouds was assumed to be 300 to 700 meters. The figure is oriented so that the sea is in the right part, the borders of a figure are corresponding to the borders of Odessa city. Approximately one can assume that the contours of complex potential reflect the variation in time of the speed field, namely 0.5 m/s for an hour. Density of current lines is adequate to the flows speed, about 1 m/s to 0.5 cm of gradient in Figure. Analysis of the potential function gives the following: if  $v_x > 0$ , the speed rate increases in the direction of positive foci (and similarly on  $y$ ).

This means that the potential function draws flow in positive foci. The direction of flow is obtained from the definition of the current function, i.e.,  $v_x > 0$ , if  $\partial\phi/\partial y > 0$ . It means an availability of positive foci of the current function from a flow direction. The isolines in Figure 2 are not signed, as modular values depend on many factors, notably than intensity of convection, which determines the involvement currents power and density of cloud arrays. In whole, ventilation is manifested in the focal point from the sea side. The field of the current function in Fig.2b in this case is consistent with the field of the ventilation potential.

Another application the LACCF approach is studying the air mass ventilation in the region of the Fukushima nuclear power plant (FNPP) after accident of Marc 2011. We have carried put calculation of the ventilation potential and the current function at FNPP analogously to the previous ones and compare the obtained data with the similar theoretical ECMWF model data and observed ones (see [26-27]).

The detailed analysis will be presented in the separate paper. Here we only note that the ECMWF modeled air transfer speed is often higher than the observed values, which is consistent with the difference in heights between observations [27]. While the LACCF1 our data (model parameters, taken according to methodics [6]) are not in good agreement with the observed data, on the contrary, LACCF2 our data (calibrated parameters are corresponding to real meteo data) are quite realistic in agreement with the observed ones. That is significantly provided by using the real input parameters values. During March 15, the LACCF 2 data indicate the realistic (north-north-west) air mass (plume) travel direction, whereas the ECMWF modeled direction is mostly west. Obviously, the approach presented can be effectively used in quantitative studying a local scale atmospheric ventilation (air mass transfer), however, as minimum, its further development requires an improvement of the input parameters values choice, possibly using more correct approximation of the “shallow water” model, atmospheric turbulence modelling, region orography accounting etc.

### References:

1. *A J Cimorelli, S G Perry, A Venkatram, J C Weil, R J Paine, R B Wilson, R F Lee, W D Peters and R W Brode* AERMOD: A dispersion model for industrial source applications Part I: General model formulation and boundary layer characterization// *J. Appl. Meteor.* – 2005. – Vol 44. – P. 682-693.
2. *S G Perry, A J Cimorelli, R J Paine, R W Brode, J C Weil, A Venkatram, R B Wilson, R F Lee and W D Peters* AERMOD: A dispersion model for industrial source applications Part II: Model performance against seventeen field-study databases//*J. Appl. Meteor.* – 2005. –Vol. 44. – P. 694-708.
3. *Arakava A., Shubert W.H.* Interaction of cumulus cloud ensemble with the large-scale environment//*Journ. of Atm. Sci.* – 1974. – Vol.31. – P.674-701.
4. *C D Argyropoulos, G M Sideris, M N Christolis, Z Nivolianitou, N C Markatos* Modelling pollutants dispersion and plume rise from large hydrocarbon tank fires in neutrally stratified atmosphere//*Atmospheric Environment.* – 2010. – Vol.44 (6). – P.803-813.
5. *G M Stavrakakis, P L Zervas, H Sarimveis, N C Markatos* Development of a computational tool to quantify architectural-design effects on thermal comfort in naturally ventilated rural houses//*Building and Environment.* – 2010. – Vol.45(1). – P.65-80.
6. *Bunyakova Yu., Glushkov A.* Analysis and forecast of the impact of anthropogenic factors on air basin of an industrial city. – Odessa, Ecology, 2010.
7. *Bunyakova Yu., Glushkov A., Khetselius O., Ignatenko A., Bykowszczenko N., Buyadzhi V.* New approach and microsystem technology of advanced analysis and forecasting the air pollutant concentration temporal dynamics in atmosphere of the industrial cities// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* – 2017. – Vol.14, №3. – P. 65-78.
8. *Khetselius O.* Hyperfine structure of radium// *Photoelectr.* – 2005. – №14. – P.83-85.
9. *Gubanova E., Glushkov A., Khetselius O., Bunyakova Yu., Buyadzhi V., Pavlenko*

- E.* New methods in analysis and project management of environmental activity: Electronic and radioactive waste.– Kharkiv: FOP. – 2017. – 120p.
10. Lu J., Araya S.P., Snyder W.H., Jr. Lawson R.E. A Laboratory Study of the Urban Heat Island in a Calm and Stably Stratified Environment. Part I: Temperature Field; Part II: Velocity Field // Journal of Applied Meteorology. – 1997. – Vol.36. – P.1377-1402.
  11. Brandstater A., Swinney H. Strange attractors in weakly turbulent Couette-Taylor flow//Phys. Rev. A. – 1987. – Vol. 35. – P. 2207–2220.
  12. Ghil M., Kimoto M., Neelin J.D. Nonlinear dynamics and predictability in the atmospheric sciences//Rev.Geophys. – 1991. – Vol.29. – P.46–55.
  13. Voss R. and Mikolajewicz U. Long-term climate changes due to increased CO2 concentration in the coupled atmosphere-ocean general circulation model ECHAM3/LSG// Climate Dynamics. – 2001. – Vol.17. – P.45–60
  14. Kang I., Lau K. Principal modes of atmospheric circulation anomalies associated with global angular momentum fluctuations//J.Atm.Sci. – 1994. – Vol.51. – P.1194.
  15. Wang, C. ENSO, climate variability, and the Walker and Hadley circulations. The Hadley Circulation: Present, Past, and Future (Springer). – 2004.
  16. Boer G.J., Sargent N.E. Vertically integrated budgets of mass and energy for the globe // J. Atmos. Sci. – 1985. – Vol. 42. – P.1592-1613.
  17. Trenberth K.E., Stepaniak D.P., Caron J.M. Interannual variations in the atmospheric heat budget // J. Geophys. Res. – 2002. – Vol.107. – P.4.1-4.15
  18. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Ponomarenko E.L. Geometry of Chaos: Advanced approach to treating chaotic dynamics in some nature systems// Proc. Intern. Geom. Center. – 2014. – Vol.7(1). – P.24-30.
  19. A V Glushkov, O Yu Khetselius, E V Agayar, V V Buyadzhi, A V Romanova, V F Mansarliysky Modelling dynamics of atmosphere ventilation and industrial city's air pollution analysis: New approach//IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci. – 2017. – Vol.92. – P.012014.
  20. Bunyakova Yu.Ya., Khetselius O.Yu. Non-linear prediction statistical method in forecast of atmospheric pollutants// Proc. of the 8th International Carbon Dioxide Conference. – 2009. – P.T2-098.
  21. Khetselius O.Yu. Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction method// Dynamical Systems – Theory, Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J.Mrozowski. – 2013. – Vol.1. – P.145-152.
  22. Glushkov A., Khetselius O., Ambrosov S., Bunyakova Yu., Mansarliysky V. The use of microsystems technology "Geomath" to modeling the balance of the angular momentum of the Earth, atmospheric processes and parameters of radio waveguides: III. Nonstationary theory//Sensor Electr. and Microsyst. Techn.- 2013. – Vol.10, №1 – P.22-28.
  23. Glushkov A.V., Kuzakon V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V. Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos// Dynamical Systems Theory, eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, and J. Mrozowski (Lodz). – 2013. – Vol.T1. – P.461-466

24. *Glushkov A.V.* Relativistic Quantum Theory. Quantum mechanics of Atomic Systems. – Odessa: Astroprint, 2008.
25. *Khetselius O.Yu.* Hyperfine structure of atomic spectra. – Odessa: Astroprint, 2008.
26. *Glushkov A., Safranov T., Khetselius O., Ignatenko A., Buyadzi V., Svinarenko A.* Analysis and forecast of the environmental radioactivity dynamics based on methods of chaos theory: General conceptions// Environm. Problems. – 2016. – Vol.1, №2. – P.115-120.
27. *Korsakissok I., Mathieu A., Didier D.* Atmospheric dispersion and ground deposition induced by the Fukushima Nuclear Power Plant accident: A local-scale simulation and sensitivity study// Atm.Env. – 2013. – Vol.70. – P.267-279.

***Софронков О.Н., Хецеліус О.Ю., Глушков О.В.,  
Будьжи В.В., Романова Г.В., Ігнатенко Г.В.***

**Новий геофізичний комплексно-польовий підхід до моделювання динаміки тепло-масо-переносу та вентиляції в атмосфері промислового регіону**

АНОТАЦІЯ

*Новий узагальнений підхід, що включає вдосконалену теорію атмосферної вентиляції в поєднанні з моделлю гідродинамічного прогнозу (з кількісним урахуванням турбулентності в атмосфері міської території) і методами теорії комплексного геофізичного поля та Аракави-Шуберта розрахунку кучкової конвекції застосовано до моделювання тепло-масо-переносу та повітряної вентиляції в атмосфері промислового міста (регіону). Представлені результати моделювання параметрів повітряної вентиляції (мезоциркуляції) над територією м. Одеси, а також районом атомної електростанції Фукусіма.*

***Софронков А.Н., Хецелиус О.Ю., Глушков А.В.,  
Будьжи В.В., Романова А.В., Игнатенко А.В.***

**Новый геофизический комплексно-полевой подход к моделированию динамики тепло-массо-переноса и вентиляции в атмосфере промышленного региона**

АНОТАЦИЯ

*Новый обобщенный подход, включающий усовершенствованную теорию атмосферной циркуляции в сочетании с моделью гидродинамического прогноза (с количественно корректным учетом турбулентности в атмосфере городской территории), теорией плоского комплексного геофизического поля и методом Аракава-Шуберта расчета облачной конвекции применен к моделированию тепло-массо-переноса и воздушной вентиляции в атмосфере промышленного города (региона). Представлены результаты моделирования параметров воздушной вентиляции (мезоциркуляции) над территорией м. Одессы, а также районом атомной электростанции Фукусима.*

## ЕЛЕКТРОФІЗИКА

УДК: 621.791; 533.9

**Вишняков В. И., Киро С. А., Кабаненко Р.В.**

*Физико-химический институт защиты окружающей среды и человека, г. Одесса  
E-mail: drvishnyakov@mail.ru, serkiro1955@gmail.com*

### Методика зондовой диагностики плазмы сварочного аэрозоля

*Рассмотрена возможность применения зондовых измерений в плазме сварочного аэрозоля. Обнаружено, что плазма сварочного аэрозоля содержит только положительно заряженные ионы и отрицательно заряженные частицы. Проведено компьютерное моделирование поведения сигнала зонда в ионно-пылевой плазме. Предложена методика обработки зондовых измерений в плазме сварочного аэрозоля.*

**Введение.** Описание взаимодействия одиночного зонда с плазмой существенно зависит от числа Кнудсена, которое определяется отношением длины свободного пробега носителей заряда  $\lambda$  к характерному размеру зонда  $L_p$ :  $Kn = \lambda / L_p$ . В случае бесстолкновительной плазмы  $Kn \gg 1$  и их взаимодействие описывается в Ленгмюровском приближении [1]. В этом случае равновесное значение потенциала одиночного зонда, которое называется плавающим потенциалом, определяется балансом потоков электронов и ионов плазмы на зонд:

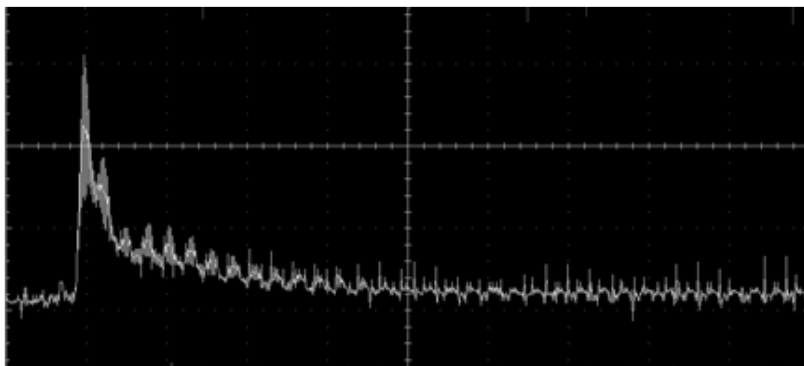
$$\phi_f = \frac{kT}{2e} \ln \frac{m_e}{m_i}, \quad (1)$$

где  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура плазмы,  $e$  - заряд электрона,  $m_e$  - масса электрона,  $m_i$  - масса иона. Предполагается, что изотермическая плазма содержит один сорт однозарядных положительных ионов и является нейтральной, то есть средние концентрации электронов и ионов равны:  $n_e = n_i = n_0$ , где  $n_0$  - невозмущенная концентрация. Плавающий потенциал имеет отрицательное значение, так как масса иона гораздо больше массы электрона.

В столкновительной плазме (например, термическая плазма) число Кнудсена  $Kn \ll 1$  и теория зонда Ленгмюра становится неприменимой. Более того, поверхность зонда влияет на ионизационное равновесие плазмы, так как не только поглощает и эмитирует электроны, но и является дополнительным каналом ионизации атомов и рекомбинации ионов плазмы. С учетом этих факторов плавающий потенциал зонда в столкновительной плазме описывается уравнением [2]:

$$\frac{n_0}{v_e} \exp\left(\frac{W_{pr} + 2e\phi_f}{kT} + \text{th} \frac{e\phi_f}{4kT}\right) = 2 \text{ch} \frac{e\phi_f}{kT} - 1,$$





**Рис. 1** Типичный сигнал одиночного зонда, простреливаемого через плазму сварочного аэрозоля

где  $v_e = 2(m_e kT / 2\pi\hbar^2)^{3/2}$  – эффективная плотность состояний электрона,  $W_{pr}$  – работа выхода для материала зонда. В этом случае плавающий потенциал также имеет отрицательное значение и может быть описан аппроксимирующим выражением

$$\phi_f \cong -\frac{kT}{3e} \left( \ln \frac{n_0}{v_e} + \frac{W}{kT} \right). \quad (2)$$

Зондовые измерения в области формирования первичных нанометровых частиц (температура плазмы 1700-2500 К) при электродуговой сварке металлов в защитном газе показали, что потенциал одиночного зонда положительнее (рис.1), из чего следует, что поток положительных ионов на зонд превышает поток электронов. Это означает, что электронов в газовой фазе значительно меньше ионов, то есть газовая фаза представляет собой ионно-пылевую плазму, где большая часть электронов захвачена частицами, при этом отсутствие электронов в газовой фазе не позволяет реализоваться ионизации электронным ударом.

Частота столкновений свободных электронов с частицами намного больше, чем с ионами. Поэтому, в результате спорадических столкновений электроны поглощаются частицами, которые приобретают отрицательный заряд.

Зонд в такой плазме не может рассматриваться в рамках равновесной теории. Понятие плавающего потенциала к такому зонду неприменимо. Имеет смысл говорить только о токе ионов на зонд и описывать взаимодействие зонда с плазмой сварочного аэрозоля следует в рамках несбалансированных потоков. Настоящая работа посвящена моделированию взаимодействия зонда с ионно-пылевой плазмой и разработке методики зондовой диагностики плазмы сварочного аэрозоля, образующейся при электродуговой сварке металлов в защитном газе.

**Ток зонда в ионно-пылевой плазме.** Зондовые измерения производятся путем прострела зонда через область, занимаемую плазмой. При входе в об-

ласть плазмы зонд имеет температуру окружающего воздуха  $T_{pr} \sim 300\text{K}$ , тогда как температура плазмы [3]

$$T_{pl} = T_0 + (T_{vap} - T_0) \exp \frac{-r_0}{\tau_{mix} v_{mix}}, \quad (3)$$

и при электродуговой сварке металлов в защитном газе может изменяться в диапазоне  $T_{pl} \sim 1500-2700\text{K}$  в зависимости от расстояния между точкой измерения и дугой  $r_0$ . Здесь  $T_0 = 300\text{K}$  - температура окружающей среды,  $T_{vap} \sim 3000\text{K}$  - начальная температура потока паров сварочных материалов из зоны дуги,  $\tau_{mix} = 1.7\text{мс}$  - постоянная времени смешения потока паров с защитным газом,  $v_{mix} \sim 1.5\text{м/с}$  - средняя скорость потока парогазовой смеси в области измерения.

Из условия поглощения заряда (нейтрализации) ионов поверхностью зонда следует, что их концентрация у поверхности зонда равна нулю. Таким образом, вблизи поверхности зонда существуют градиенты температуры и концентрации ионов, которые определяют их диффузионный поток на поверхность зонда:

$$j_i = \frac{D_i}{T} \nabla(n_i T) = D_i \nabla n_i + D_i n_i \frac{1}{T} \nabla T, \quad (4)$$

где  $D_i$  - коэффициент диффузии ионов.

Нагрев зонда происходит путем передачи энергии ионами. Поэтому оба градиента в (4) определяются длиной свободного пробега ионов,

$$\nabla n_i = \frac{n_i}{\lambda_i}, \quad \nabla T = \frac{T_{pl} - T_{pr}}{\lambda_i}.$$

Учитывая, что коэффициент диффузии  $D_i = (1/3)\lambda_i v_{Ti}$ , где  $v_{Ti} = \sqrt{8kT_{pl} / \pi m_i}$  - тепловая скорость ионов, из уравнения (4) следует:

$$j_i = \frac{1}{3} n_i v_{Ti} \left( 1 + \frac{T_{pl} - T_{pr}}{T_{pr}} \right) = \frac{1}{3} n_i v_{Ti} \frac{T_{pl}}{T_{pr}}. \quad (5)$$

Наряду с потоком (5) при расчете температуры зонда следует учитывать поток атомов на зонд, который определяется только градиентом температуры (концентрация атомов у поверхности зонда незначительно превышает их концентрацию в объеме плазмы за счет нейтрализации ионов, но  $n_a \gg n_i$ , и таким различием можно пренебречь):

$$j_a \cong \frac{1}{3} n_a v_{Ta} \frac{T_{pl} - T_{pr}}{T_{pr}}, \quad (6)$$

где  $v_{Ta} \cong v_{Ti}$  - тепловая скорость атомов.

Из уравнения (5) следует, что поток ионов на зонд зависит от отношения температуры плазмы к температуре зонда. Максимальное значение поток имеет при входе зонда в плазму, когда температура его минимальна. По мере прогрева зонда поток ионов уменьшается вплоть до значения, близкого к потоку спо-

радикаческих столкновений  $(1/4)n_i v_{Ti}$ , что соответствует результатам измерений, представленным на рис. 1.

Измеряемый сигнал на омической нагрузке  $R_{pr}$  равен

$$U_{pr} = R_{pr} S_{pr} e j_i, \quad (7)$$

где  $S_{pr} = \pi r_{pr}^2 + 2\pi r_{pr} L_{pr}$  – площадь поверхности зонда,  $r_{pr}$  – радиус цилиндрического зонда,  $L_{pr}$  – его длина.

**Ионизационное равновесие в ионно-пылевой плазме.** В многокомпонентной плазме сварочного аэрозоля равновесная концентрация атомов  $j$ -того компонента остывающей парогазовой смеси в окрестности зонда определяется как [3]

$$n_{Aj0} = \frac{P}{kT_{pl}} g_j, \quad g_j = \frac{g_{j0}}{\mu_j \sum_j \frac{g_{j0}}{\mu_j} + \frac{\mu_j}{\mu_0} \frac{T_{vap} - T_{pl}}{T_{pl} - T_0}}$$

где  $P$  – атмосферное давление,  $g_{j0}$  – начальная массовая доля  $j$ -того компонента в парах (определяется составом свариваемых материалов),  $\mu_j$  – его молекулярная масса,  $\mu_0$  – средняя молекулярная масса окружающей среды.

В результате конденсации часть атомов  $j$ -того компонента переходит в конденсированную фазу (в каждой частице содержится  $4\pi r_p^3 \rho g_j / 3m_{aj}$  атомов  $j$ -того компонента парогазовой смеси, где  $r_p$  – средний радиус частицы,  $\rho$  – ее плотность,  $m_{aj}$  – атомная масса  $j$ -того компонента). Тогда концентрация атомов  $j$ -того компонента в остывающей парогазовой смеси, содержащей частицы со средней концентрацией  $n_p$ , определяется уравнением

$$n_{Aj} = g_j \left( \frac{P}{kT_{pl}} - \frac{4\pi r_p^3 \rho n_p}{3m_{aj}} \right). \quad (8)$$

Ввиду отсутствия электронов в газовой фазе (частицы имеют отрицательный заряд), существует только два канала ионизации атомов: УФ-ионизация и поверхностная ионизация, и один канал рекомбинации за счет спорадических столкновений ионов с частицами и нейтрализацией ионов.

В дальнейшем для простоты будем считать, что парогазовая смесь содержит только один конденсирующийся и ионизирующийся компонент – железо (сварочная проволока содержит более 97% Fe).

В таком случае, поверхностная ионизация атомов определяется уравнением Саха-Ленгмюра:

$$\alpha_s = \frac{n_{is}}{n_{as}} = \frac{\sum_i}{\sum_a} \exp \frac{W_p - I}{kT}, \quad (9)$$

где  $n_{is}$ , и  $n_{as}$  – концентрации ионов и атомов железа у поверхности частицы,  $\Sigma_i$  и  $\Sigma_a$  – их статистические веса,  $I$  – потенциал ионизации железа,  $W_p$  – работа выхода для материала частиц, в данном случае - железа.

Тогда можно определить изменение концентрации ионов железа в плазме:

$$\frac{dn_i}{dt} = n_A \pi r_a^2 j_{ph} + n_A n_p v_{Ta} \sigma_{ap} \alpha_s - n_i n_p v_{Ti} \sigma_{ip} \gamma_s, \quad (10)$$

где  $r_a$  – радиус атома железа,  $j_{ph}$  – плотность потока фотонов с энергией, превышающей 7.9 эВ (потенциал ионизации железа),  $\sigma_{ap}$  – сечение столкновения атома с частицей,  $\sigma_{ip}$  – сечение столкновений иона с частицей,  $n_i$  – концентрация ионов железа в парогазовой смеси,  $n_A$  – концентрация атомов железа в парогазовой смеси (8),  $\gamma_s \sim 0.05$  - коэффициент поверхностной рекомбинации ионов [4].

Условие электронейтральности ионно-пылевой плазмы  $n_i = Zn_p$  ( $Z$  – заряд частиц в элементарных зарядах) предполагает, что при  $n_i < n_p$  заряд частиц  $|Z| < 1$ , то есть заряжены далеко не все частицы. Поэтому, во-первых, при определении сечений столкновений можно пренебречь кулоновским взаимодействием и определить  $\sigma_{ap} = \sigma_{ip} = \pi r_p^2$ , во-вторых, пренебречь потенциальным барьером на границе плазма-частица и принять  $n_{is} \cong n_i$ .

В состоянии локального равновесия  $dn_i/dt = 0$  и степень ионизации атомов железа в плазме сварочного аэрозоля определяется уравнением

$$\frac{n_i}{n_A} = \frac{\alpha_s}{\gamma_s} + \frac{r_a^2 j_{ph}}{n_p r_p^2 v_{Ta} \gamma_s}. \quad (11)$$

**Температура зонда.** Нагрев зонда определяется притоком тепла за счет энергии, переносимой ионами и атомами парогазовой смеси на зонд и оттоком тепла за счет термоэлектронной эмиссии (испарением материала зонда при измеряемых температурах можно пренебречь) и теплопроводности зонда. Поток ионов (5) переносит на зонд свою кинетическую энергию  $3kT_{pl}/2$  и потенциальную энергию, равную разности между потенциалом ионизации  $I$  и работой выхода электрона из материала зонда  $W_{pr}$  [5]. Плотность потока энергии, переносимой ионами, равна

$$\Gamma_i = \frac{1}{3} n_i v_{Ti} \frac{T_{pl}}{T_{pr}} \left( I - W_{pr} + \frac{3}{2} kT_{pl} \right).$$

Плотность потока энергии, переносимой атомами равна

$$\Gamma_a = \frac{1}{2} n_A v_{Ta} \frac{T_{pl} - T_{pr}}{T_{pr}} kT_{pl},$$

где концентрация атомов  $n_A$  определяется формулой (8).

Термоэлектронная эмиссия с поверхности зонда определяется потоком Ричардсона-Дэшмана:

$$j_e^{em} = \frac{4\pi m_e (kT_{pr})^2}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{W_{pr}}{kT_{pr}}\right) = \frac{1}{4} v_e v_{Te} \exp\left(-\frac{W_{pr}}{kT_{pr}}\right),$$

где  $v_e = 2(m_e kT_{pr} / 2\pi\hbar^2)^{3/2}$  – эффективная плотность состояний электрона,  $m_e$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $v_{Te} = \sqrt{8kT_{pr} / \pi m_e}$  – тепловая скорость электронов.

Электроны переносят энергию, плотность потока которой равна

$$\Gamma_e = j_e^{em} \left( W_{pr} + \frac{3}{2} kT_{pr} \right).$$

Отток тепла за счет теплопроводности зонда определяется градиентом температуры вдоль зонда

$$\Gamma_q = \kappa \frac{T_{pr} - T_0}{L},$$

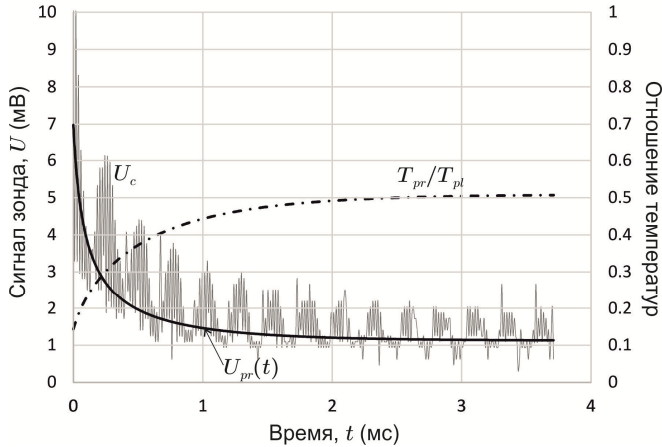
где  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности материала зонда,  $L$  – характерная длина зонда вместе с элементами его крепления.

По порядку величины поток атомов  $\Gamma_a \gg \Gamma_{ion}, \Gamma_e$ , поэтому изменение температуры зонда определяется уравнением

$$\frac{dT_{pr}}{dt} = \frac{1}{\rho_{pr} V_{pr} c_{pr}} \frac{dQ}{dt} \cong \frac{S_{pr}}{\rho_{pr} V_{pr} c_{pr}} \left( \frac{1}{2} n_A v_{Ta} \frac{T_{pl} - T_{pr}}{T_{pr}} kT_{pl} - \kappa \frac{T_{pr} - T_0}{L} \right), \quad (12)$$

где  $Q$  – количество тепла,  $V_{pr} = \pi r_{pr}^2 L_{pr}$  – объем зонда,  $\rho_{pr}$  – его плотность,  $c_{pr}$  – его удельная теплоемкость.

**Результаты измерений.** Обработка осциллограмм зондовых измерений проводилась путем подбора параметров парогазовой смеси таким образом, чтобы рассчитанное изменение сигнала зонда (7)  $U_{pr}(t)$  совпадало с измеренной зависимостью  $U_c(t)$ . Через плазму сварочного аэрозоля, образующейся при электродуговой наплавке низкоуглеродистой стали в защитном газе ( $U = 20.5$  В,  $I = 95 \pm 5$  А, скорость подачи проволоки Св08Г2С – 9.2см/с, расход CO<sub>2</sub> – 10 л/мин), на расстоянии  $r_0$  от столба дуги со скоростью 23 см/с простреливалась система двух одинаковых зондов, расположенных на расстоянии 0.2 мм друг от друга. Один зонд заземлен и является опорным, второй – заземлен через нагрузочное сопротивление  $R_{pr}$  и является измерительным. Температура плазмы сварочного аэрозоля в точке измерения вычислялась по формуле (3). Средняя скорость потока плазмы в области измерения  $v_{mix} = 1.5$  м/с и постоянная времени смешения  $\tau_{mix} = 1.7$  мс определялись независимыми измерениями.



**Рис. 2** Измеренные и рассчитанные значения сигнала зонда

**Таблица 1.** Параметры плазмы сварочного аэрозоля

Плотность потока фотонов, $j_{ph}$	$2 \times 10^{16} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-2}$
Температура в точке измерения, $T_{pl}$	2000 К
Концентрация ионов, $n_i$	$1.1 \times 10^{11} \text{ см}^{-3}$
Концентрация атомов, $n_A$	$2.5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$
Исходная концентрация атомов, $n_{A0}$	$9 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$
Концентрация частиц, $n_p$	$10^{15} \text{ см}^{-3}$
Радиус частиц, $r_p$	1.4 нм

Сигнал зонда регистрировался цифровым осциллографом DSO3204 (Hantek, Китай) и передавался в компьютер. Из всего набора измеренных значений сигнала вырезался вектор, начальное значение которого совпадает с максимумом сигнала, что соответствует входу зонда в плазму. При этом температура зонда соответствует температуре окружающей среды. Для исключения высокочастотного шума усреднялись первые значения и по результирующей величине  $U_{c0}$  определялась концентрация ионов

$$n_i = \frac{3T_0 U_{c0}}{e v_{Tl} T_{pl} R_{pr} S_{pr}}$$

На рис.2 приведены результаты измерения и компьютерного моделирования сигнала зонда при: длина зонда  $L_{pr} = 0.2 \text{ мм}$ , диаметр зонда  $d_{pr} = 0.35 \text{ мм}$ , сопротивление нагрузки  $R_{pr} = 800 \text{ ом}$ , расстояние от столба дуги до точки измерения  $r_0 = 1.5 \text{ мм}$ .

Наилучшее совпадение расчетной  $U_{pr}(t)$  и экспериментальной  $U_c(t)$  кривых наблюдается, если принять параметры плазмы, отображенные в табл. 1.

Таким образом, моделирование зондового тока в ионно-пылевой плазме и уравнение энергетического баланса измерительного зонда позволяют оценить комплекс основных параметров плазмы сварочного аэрозоля в точке измерения: температуру плазмы, концентрацию ионов и степень ионизации плазмы, концентрацию частиц и их размер.

**Заключение.** Для плазмы сварочного аэрозоля предложена и апробирована методика зондовых измерений, основанная на измерении потенциала движущегося зонда. Показано, что плазма сварочного аэрозоля в области формирования первичных частиц содержит преимущественно положительно заряженные ионы и отрицательно заряженные наноразмерные частицы. Предложена упрощенная теория зондовых измерений в плазме сварочного аэрозоля, которая позволяет интерпретировать экспериментальные результаты и оценить комплекс основных параметров плазмы сварочного аэрозоля в точке измерения.

#### Литература:

1. *Langmuir L.* The interaction of electron and ion space charges in cathode sheath // *Physical Review.* – 1929. - V. 33. – P. 954-989.
2. *Vishnyakov V.I.* Probe in the thermal collision plasma // *Physics of Plasmas.* – 2007. - V.14(1). – P. 013502(1-5).
3. *Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Oprya M.V., Ennan A.A.* Effect of shielding gas temperature on the welding fume particle formation: Theoretical model // *Journal of Aerosol Science.* – 2018. - V. 124. – P. 112-121.
4. *Зандберг Э.Я., Ионов Н.И.* Поверхностная ионизация. – М.: Наука, 1969. – 432 с.
5. *Benilov M.S.* Understanding and modelling plasma-electrode interaction in high-pressure arc discharge: a review // *Journal of Physics D: Applied Physics.* – 2008. – V. 41(14). – P. 144001(1-30).

***Вишняков В. І., Кіро С. А., Кабаненко Р.В.***

**Методика зондової діагностики плазми зварювального аерозолю.**

#### АНОТАЦІЯ

*Розглянуто можливість застосування зондових вимірювань у плазмі зварювального аерозолю. Показано, що плазма зварювального аерозолю переважно містить позитивно заряджені іони і негативно заряджені нанометрові частинки. Проведено комп'ютерне моделювання поведінки сигналу зонда в іонно-пилувій плазмі. Запропоновано методику обробки зондових вимірювань у плазмі зварювального аерозолю.*

***Vishnyakov V. I., Kiro S.A., Kabanenko R.V.***  
**Technique of probe diagnostics in the welding fume plasma.**

**SUMMARY**

*The possibility of using probe measurements in the welding fume plasma is considered. It was found out that welding fume plasmas contains predominantly positively charged ions and negatively charged nanometer particles. The behavior of probe signal in the ion-dust plasma is considered via numerical modelling. The procedure of the probe measuring processing in the welding fume plasma is proposed.*



**Драган Г. С., Колесников К. В., Кутаров В. В.**

*Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова*

### **Температурный профиль сферического объема плазмы с учетом рекомбинационных процессов**

*Разработана физико-математическая модель теплового баланса открытой плазменной среды с центральным источником при наличии отрицательного градиента температуры и с учетом ионизационно-рекомбинационных процессов. Скорость ионизации рассчитывалась по формуле Дравина на основе приближения Бете-Борна, скорость рекомбинации описывается обобщенной теорией Томпсона. Показано, что отрицательный градиент температуры приводит к нарушению равновесия ионизационно-рекомбинационных процессов, в результате чего тепловыделение за счет рекомбинации преобладает по отношению к теплотерям за счет ионизации, что существенно влияет на температурные профили. Проведены расчеты профилей температуры с учетом ионизации и рекомбинации железа при различных параметрах среды.*

**Введение.** При расчетах потоков низкотемпературной плазмы в каналах [1] или в открытом пространстве [2], а также при распаде плазмы, образующейся в результате взрыва [3], необходимо знать распределение температуры среды к периферийным участкам. Остывание плазмы происходит за счет выноса энергии путем теплопроводности, излучения и конвекции. Такие ситуации реализуются в факеле газодисперсного металлизированного пламени [1-3], электродугового разряда [4, 5], канале магнито-гидродинамического генератора [6] и других случаях. Во многих случаях источник плазмы можно представить точечным, что позволяет перейти к сферической симметрии при решении данной задачи.

Обычно радиальное распределение температуры по сечению факела имеет вид гиперболической зависимости с отрицательным градиентом температуры, что обусловлено стационарным теплоотводом в окружающую среду. Факел газодисперсного пламени или электродугового разряда в ядре имеет температуру в пределах 2000-6000 К, и поэтому атомы газовой фазы в значительной степени ионизированы. Температурные профили факела, являются неизменными, что обеспечивается стабильным внутренним источником энергии и постоянным значением температуры окружающей среды. Таким образом, при расчете температурных профилей факела обычно рассматриваются только указанные теплотери.

Наряду с тем, при ионизации атомов газовой фазы затрачивается определенная энергия, равная энергии ионизации атома. Безусловно, что при обратном процессе – рекомбинации электрона с ионом происходит выделение такой же энергии в плазменной среде. Эти процессы могут играть значительную роль при определении профиля температуры. Действительно, ионизационно-рекомбинационные процессы в данном случае аналогичны конденсации и испарению капель, при которых выделяется или затрачивается тепловая энергия.

Ионизационно-рекомбинационные процессы в равновесной плазменной среде описываются при помощи уравнения Саха, согласно которому для ионизации атомов среды необходимо затратить энергию равную потенциалу ионизации. В равновесном случае выполняется принцип детального равновесия, при котором скорость ионизации равна скорости рекомбинации. Этому процессу соответствует равенство выделяемой и поглощаемой энергии. Однако при наличии постоянного отрицательного градиента температуры среды ионизационное равновесие смещается в сторону уменьшения степени ионизации за счет рекомбинационных процессов, то есть скорость рекомбинации превышает скорость ионизации, что нарушает тепловой баланс. Следовательно, эту часть энергии необходимо учитывать в уравнении теплового баланса.

Настоящая работа посвящена разработке физико-математической модели теплового баланса и определению температурного профиля открытой плазменной среды с центральным источником при наличии отрицательного градиента температуры и с учетом рекомбинационных процессов.

**Постановка задачи.** Низкотемпературная плазма имеет внутренний источник энергии и распространяется в среде с постоянной температурой. Предположим, что ионизация атомов происходит электронным ударом, а при рекомбинации электрона с положительным ионом энергия ионизации превращается в тепловую энергию в результате столкновений возбужденного атома с другими атомами или молекулами. Последнее возможно в плазменной среде при атмосферном или повышенном давлении. Излучательной рекомбинацией пренебрегаем.

Пусть теплотери, обусловленные теплопроводностью, излучением и конвекцией постоянны, в результате чего устанавливается некоторое радиальное распределение температуры плазмы. Задаем граничные условия: температура центрального участка плазмы равна  $T_0$ , а температура на границе плазмы равна температуре окружающей среды. Тогда стационарное уравнение теплопроводности с внутренними источниками энергии можно представить в виде:

$$\lambda \Delta T = -Q_r \frac{dn_e}{dt} + Q_i, \quad (1)$$

где  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,  $T$  – температура,  $Q_r$  – тепловой эффект рекомбинации,  $n_e$  – среднее значение концентрации электронов при однократной ионизации,  $Q_i$  – другие возможные источники.

При рассмотрении задачи будем предполагать, что факел стационарный и поэтому можно ограничиться рассмотрением стационарной задачи теплопроводности, представленное в уравнении (1). Входящий в это уравнение коэффициент теплопроводности является степенной функцией температуры. Это обстоятельство необходимо учитывать при численных расчетах. Однако, на данном этапе исследования для облегчения вывода аналитических выражений будем полагать коэффициент теплопроводности некоторой постоянной, усредненной по всему объему плазмы.

Равновесная концентрация электронов определяется из формулы Саха:

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \frac{v_e v_i}{v_a} \exp\left(\frac{-I}{k_B T}\right). \quad (2)$$

где  $v_{e,i,a}$  – эффективная плотность состояний электронов, ионов и атомов соответственно,  $I$  – потенциал ионизации атомов равный энергии, выделяемой при рекомбинации,  $T$  – температура,  $k_B$  – постоянная Больцмана.

Скорость изменения концентрации электронов определяем из равенства:

$$\frac{dn_e}{dt} = \alpha_{ion} - \beta_{rec}. \quad (3)$$

Скорость ионизации  $\alpha_{ion}$  находится из полуэмпирической формулы, предложенной Дравином на основе приближения Бете-Борна [7]:

$$\alpha_{ion} = 8\pi a_0^2 \left(\frac{R_y}{E_k}\right)^2 f_k N \sqrt{\frac{2k_B T}{\pi m_e}} u_k \Psi_1(u_k). \quad (4)$$

где  $a_0$  – радиус Бора,  $R_y$  – энергия Ридберга,  $E_k$  – энергия связи атома,  $f$  – функция, которая согласно простейшей теории Томсона принимает вид

$$f(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2}, \quad u_k = \frac{E_k}{k_B T},$$

Значения функции  $\Psi_k$  приведены в [7, С. 42].

Скорость рекомбинации  $\beta_{rec}$  [8] хорошо согласуется с численными расчетами [9] и относится к температурам до 5000 К. При всей ее простоте обобщенная теория Томпсона дает результат, близко совпадающий с результатами более сложных вычислений.

$$\beta_{rec} = 1.09 \cdot 10^{-20} n_e T^{\frac{9}{2}}. \quad (5)$$

Сравним скорости ионизации и рекомбинации в зависимости от температуры (рис.1). Как видно из графиков, скорость рекомбинации превышает скорость ионизации, что можно объясняется наличием смещения ионизационного равновесия при снижении температуры среды и преобладанием рекомбинационных процессов над ионизационными.

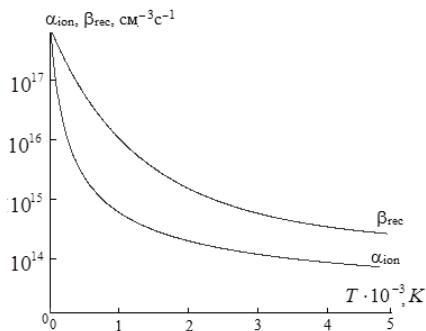
Определим граничные условия задачи в виде постоянных значений температуры среды на границах системы. При  $r = r_0$ ,  $T(r_0) = T_0$ , а на бесконечности температура плазмы равняется с температурой окружающей среды, то есть при  $r = r_\infty$ ,  $T(r_\infty) = T_s$ .

Учитывая вышеизложенное, запишем уравнение теплопроводности (1) в сферической системе координат

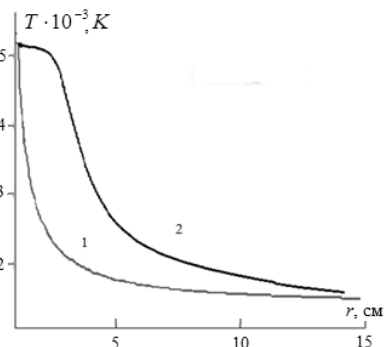
$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) = -\frac{Q_r}{\lambda} \left( AT^{\frac{1}{2}} - BT^{\frac{9}{2}} \right). \quad (6)$$

Разделив переменные в (7) и дважды проинтегрировав по координате  $dr$ , получим зависимость  $T(r)$ :

$$T(r) = T_0 - (Ar^4 - B)r^{\frac{3}{2}}. \quad (7)$$



**Рис. 1.** Зависимости скорости ионизации  $\alpha_{ion}$  и скорости рекомбинации  $\beta_{rec}$  от температуры



**Рис. 2.** Температурные профили расширяющейся плазмы с центральным источником: 1 – расчет по аналитическому решению, 2 – расчет методом численного интегрирования с интенсивно идущими рекомбинационными и ионизационными процессами

где  $A, B$  – константы интегрирования.

Расчеты проводились для частиц железа, потенциал ионизации атомов железа  $I = 7.9$  эВ, энергия связи атома  $E_k = 4.27$  эВ. Результаты расчетов приведены на рис. 2. Выпуклость температурного профиля на кривой 2 физически объясняется значительным по мощности тепловыделением в результате преобладания рекомбинации над ионизацией в объеме плазмы. Фактором, который ослабляет действие этих источников, является, уменьшение тепловой скорости ионов с уменьшением температуры и довольно резкое снижение степени ионизации плазмы, вызванное, как уже отмечалось, смещением ионизационного равновесия.

**Заключение.** Проведенные исследования показали, что ионизационно-рекомбинационные процессы могут существенно повлиять на профиль температуры в плазменной среде с отрицательным градиентом температуры, что обусловлено смещением ионизационного равновесия при понижении температуры плазменной среды, причем при низких температурах тепловой эффект снижается из-за экспоненциальной зависимости степени ионизации от температуры.

### Литература:

1. Драган Г.С. // Вестник Одесск. гос. ун-та. – 2003. – Т 8. – Вып.2. Физ.-мат. науки. – С. 163-185.
2. Золотко А.Н., Вовчук Я.И., Полетаев Н.И., Флорко А.В. Синтез наноксидов в двухфазных ламинарных пламенах // Физика горения и взрыва. – 1996. – Т. 32., №3. – С. 24-34.
3. Ageev N.D., Kiro S.A., Kostishin Yu.N. in: Challenges in Propellants and Combustion

100 Years Nobel, May 1996.

4. *Ennan A.A., Dragan G.S.* // Вкн. «Dusty plasmas in applications». 2nd Intern. Confer., August, 2007, Odessa, Ukraine. – P.35-37.
5. *G.S. Dragan et. al.* // Contr. 2-th Intern. Conf "Dusty plasmas in applications" 2007, Odessa, Ukraine. – P. 30-32.
6. *Велихов Е.П., Волков Ю.М., Дьяконов Б.П. и др.* Исследование импульсных МГД-генераторов для геофизических исследований и прогноза землетрясений. // Тр. УИ Междунар. конф. по МГДГ. – Вашингтон. – 1975. – Т. 5. – С. 211-223.
7. *Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы – М.: Наука, 1982. – 378 с.
8. *Bates D R, Kingston A E & McWhirter R W P.* Recombination between electrons and atomic ions. I. Optically thin plasmas. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 267:297-312, 1962.
9. *Hinnov E., Hirschber J. G.* Electron-Ion Recombination in Dense Plasmas // Phys. Rev. – 1962. – Vol.125. – P. 795.

**Драган Г. С., Колесніков К. В., Кутаров В. В.**  
**Температурний профіль сферичного об'єму плазми з врахуванням  
рекомбінаційних процесів**

**АНОТАЦІЯ**

*Розроблено фізико-математична модель теплового балансу відкритого плазменного середовища з центральним джерелом при наявності негативного градієнта температури і з урахуванням іонізаційно-рекомбінаційних процесів. Швидкість іонізації розраховувалася за формулою Дравіна на основі наближення Бете-Борна, швидкість рекомбінації описується узагальненою теорією Томпсона. Показано, що від'ємний градієнт температури призводить до порушення рівноваги іонізаційно-рекомбінаційних процесів, в результаті чого тепловиділення за рахунок рекомбінації переважає по відношенню до тепловтрат за рахунок іонізації, що суттєво впливає на температурні профілі. Проведено розрахунки профілів температури з урахуванням іонізації і рекомбінації заліза при різних параметрах середовища.*

**Dragan G.S., Kolesnikov K.V., Kutarov V.V.**  
**Temperature profile of a spherical plasma volume, taking into account  
recombination processes**

**Summary**

*A physical-mathematical model of the heat balance of an open plasma environment with a central source in the presence of a negative temperature gradient and taking into account ionization-recombination processes has been developed. The ionization speed was calculated using the Dravin formula based on the Bethe-Born approximation; the recombination speed is described by the generalized Thompson theory. It is shown that a negative temperature gradient leads to an imbalance of ionization-recombination processes, as a result of which heat release due to recombination prevails in relation to heat losses due to ionization, which significantly affects the temperature profiles. The temperature profiles were calculated taking into account the ionization and recombination of iron for various parameters of the environment.*

## ФІЗИКА АЕРОЗОЛІВ

УДК: 621.791; 533.9

**Вишняков В. И., Опря М. В., Эннан А. А.-А.**

*Физико-химический институт защиты окружающей среды и человека, г. Одесса*  
*E-mail: drvishnyakov@mail.ru, serkiro1955@gmail.com*

### **Влияние щелочной присадки в защитном газе на дисперсный состав сварочного аэрозоля.**

*Рассмотрен ионизационный баланс в плазме сварочного аэрозоля при электродуговой сварке металлов в защитном газе. Наличие конденсированных частиц приводит к ионизации атомов газа на поверхности частиц и смещению ионизационного баланса в области пространственного заряда вокруг частицы. Поэтому, средние концентрации электронов и ионов в плазме изменяются в присутствии заряженных частиц. Это влияет на процесс образования зародышей и, соответственно, изменяет скорость образования частиц сварочного аэрозоля. Измерены скорости образования частиц при различном содержании присадок калия в защитном газе. Расчетная концентрация зародышей при различном содержании присадок калия в защитном газе хорошо коррелирует с полученными экспериментальными данными.*

**Введение.** Электродуговая сварка в защитном газе сопровождается выделением высокотемпературных паров металлов в окружающее пространство. В процессе смешения паров с окружающей средой происходит их остывание, образование зародышей новой фазы, рост и коалесценция зародышей, отвердевание капелек и образование первичных частиц, их коагуляция и образование ингаляционных частиц сварочного аэрозоля размером до микрометра, представляющих опасность для здоровья сварщиков и окружающей среды [1]. Поэтому, исследования, направленные на разработку методов управления дисперсным и химическим составом ингаляционных частиц в процессе их формирования, имеют большое прикладное значение для создания безопасных условий труда в сварочном производстве.

Образование зародышей новой фазы происходит в результате гетерогенной ион-индуцированной нуклеации, т.е. центрами конденсации являются ионы. Источником ионов является ионизация атомов парогазовой смеси, и поверхностная ионизация атомов на конденсированных частицах. В газовой фазе ионизация происходит, как за счет столкновений с электронами (термическая ионизация), так и за счет взаимодействия с УФ-излучением дуги. Таким образом, существует по крайней мере три канала ионизации, которые необходимо учитывать при описании ионизационного равновесия плазмы сварочного аэрозоля. Кроме того, разные каналы ионизации-рекомбинации влияют друг на друга, поскольку каждый из них изменяет количество электронов и ионов в системе, что приводит к изменению интенсивности рекомбинации в каждом из каналов.

В работе представлены результаты теоретического изучения ионизационного равновесия в плазме сварочного аэрозоля и экспериментального исследования влияния степени ионизации плазмы на дисперсный состав ингаляционных частиц сварочного аэрозоля.

**Концентрация носителей заряда в пылевой плазме.** Ионизационное равновесие в термической плазме описывается уравнением Саха

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \frac{\Sigma_i}{\Sigma_a} v_e \exp \frac{-I}{kT} \equiv K_S, \quad (1)$$

где  $n_e$ ,  $n_i$  и  $n_a$  – средние по области локального термодинамического равновесия (ЛТР) концентрации электронов, ионов и атомов, соответственно, причем  $n_a = n_A - n_i$ ,  $n_A$  – исходная концентрация атомов;  $\Sigma_i$  и  $\Sigma_a$  – статистические суммы ионов и атомов;  $v_e = 2(m_e kT / 2\pi\hbar^2)^{3/2}$  – эффективная плотность состояний электрона;  $I$  – потенциал ионизации атомов;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура Кельвина;  $m_e$  – масса электрона;  $\hbar$  – постоянная Планка,  $K_S$  – константа Саха.

Плазма сварочного аэрозоля подвержена воздействию ультрафиолетового излучения дуги. На ионизационное равновесие влияет излучение с энергией фотона, превышающей потенциал ионизации атомов  $h\nu \geq I$ . При сварке штучными электродами (покрытие содержит соединения щелочных металлов) в плазме присутствует присадка щелочных металлов (например, калия с потенциалом ионизации  $I^K = 4.34$  эВ, или натрия с потенциалом ионизации  $I^{Na} = 5.14$  эВ), именно она определяет ионизацию плазмы. Сварочная дуга излучает ультрафиолет в указанном диапазоне с плотностью потока фотонов  $j_{ph} \sim 10^{15} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Такая интенсивность мало влияет на ионизационное равновесие в зоне конденсации паров сварочных материалов при температуре плазмы  $T \sim 2000 - 3000 \text{ К}$ . Однако в зоне коагуляции первичных частиц, при температуре  $T < 1500 \text{ К}$ , ионизация УФ-излучением оказывается определяющей.

При сварке в защитном газе пары не содержат щелочную присадку. Ультрафиолетовое излучение дуги не поглощается щелочными атомами, поэтому в окружающее пространство проникает коротковолновое излучение, что, например, обуславливает интенсивное образование озона при этом способе сварки. Источником ионов являются атомы конденсирующихся веществ, в основном атомы железа с потенциалом ионизации  $I^{Fe} = 7,9$  эВ. Ввиду того, что потенциал ионизации этих атомов гораздо выше, чем щелочных металлов, интенсивность термической ионизации меньше, чем при использовании штучных электродов, но выше интенсивность УФ-ионизации за счет большей плотности потока фотонов (используется  $j_{ph} = 10^{16} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ ).

Учет УФ-ионизации производится путем модернизации константы Саха [2]:

$$K_S^* = \frac{\sum_i v_e \exp \frac{-I}{k_B T} + \frac{\pi r_a^2 j_{ph}}{\gamma_{ei}}}{\sum_a} \quad (2)$$

где  $r_a$  – радиус ионизируемого атома;  $\gamma_{ei}$  – коэффициент электрон-ионной рекомбинации,  $\gamma_{ei} \sim 10^{-6} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$  [3].

Электрическая нейтральность плазмы означает, что

$$n_e = n_i = n_0, \quad (3)$$

где  $n_0$  – невозмущенная концентрация, которая легко определяется из уравнений (1) и (3):

$$n_0 = \sum_j \frac{K_{Sj}^*}{2} \left( \sqrt{1 + 4 \frac{n_{Aj}}{K_{Sj}^*}} - 1 \right), \quad (4)$$

где  $K_{Sj}^*$  – константа (2) для  $j$ -того ионизирующегося компонента паров,  $n_{Aj}$  – исходная концентрация атомов этого компонента.

После конденсации паров плазма насыщена капельками растущих зародышей, которые взаимодействуют с электронами и ионами плазмы. В процессе остывания происходит отвердевание капелек и образование первичных частиц, которые тоже взаимодействуют со свободными электронами и ионами. В результате межфазного взаимодействия происходит зарядка конденсированных частиц. При этом вокруг заряженных частиц образуется область пространственного заряда (ОПЗ), где происходит изменение концентраций электронов и ионов плазмы в поле частицы. Непосредственно у поверхности частицы концентрация электронов определяется балансом потока электронов, которые эмитируют из частицы за счет термоэлектрической миссии и за счет внешнего фотоэффекта [2]

$$I_e^{em} = 4\pi a^2 \frac{4\pi m_e (kT)^2}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{-W}{kT} + \pi a^2 Y_j \quad (5)$$

и обратного потока электронов из плазмы к частице за счет спорадических столкновений

$$I_e^{ads} = \pi a^2 v_{eT} n_{es}, \quad (6)$$

где  $a$  – радиус частицы;  $W$  – работа выхода электрона из частицы;  $Y$  – квантовый выход внешнего фотоэффекта;  $v_{eT} = \sqrt{8kT / \pi m_e}$  – тепловая скорость электрона;  $n_{es} = n_0 \exp(V_b / kT)$  – поверхностная концентрация электронов;  $V_b$  – потенциальный барьер в плазме у поверхности частицы.

Например, при термоэмиссии (без учета фотоэмиссии) поверхностная концентрация электронов равна  $n_{es} = v_e \exp(-W / kT)$ , и поверхностная ионизация определяется уравнением Саха-Ленгмюра [4]. В общем случае, с учетом фотоэмиссии, поверхностная концентрация электронов,

$$n_{es} = v_e \exp \frac{-W}{kT} + \frac{Y_j}{v_{eT}}, \quad (7)$$

соответственно, поверхностная ионизация плазмы



$$\frac{n_{is}}{n_{as}} = \frac{K_S^*}{v_e \exp\left(\frac{-W}{kT} + \frac{Y_j}{v_{eT}}\right)}, \quad (8)$$

при этом следует учитывать, что уравнение (8) записано только для одного компонента паров, т.е. в общем случае необходимо производить суммирование по всем ионизирующимся компонентам.

Степень ионизации атомов плазмы в ОПЗ и вне его (вдали от частицы) разная. Это связано с дополнительными каналами ионизации и рекомбинации на поверхности частицы (8), что отличает ОПЗ от остального объема плазмы. В работах [5, 6] было предложено учитывать этот факт путем введения эффективного значения потенциала ионизации, зависящего от потенциала поля частицы. Этот метод сложен для применения в рассматриваемой системе, так как кроме термической ионизации учитывается УФ-ионизация.

Существует другой подход к этой проблеме, описанный в [7, 8, 9]. В равновесной плазме для носителей заряда применяется распределение Больцмана  $n_e \sim \exp(e\varphi / kT)$ ,  $n_i \sim \exp(-e\varphi / kT)$ . Тогда ОПЗ можно рассматривать как область, где происходит отклонение плазмы от равновесия. Соответственно, концентрации электронов и ионов могут быть описаны распределениями

$$n_e = n_0 \exp\left(\frac{e\varphi}{kT}\right) + \delta n, \quad n_i = n_0 \exp\left(-\frac{e\varphi}{kT}\right) + \delta n, \quad (9)$$

где неравновесная добавка  $\delta n$  одинакова для электронов и ионов, так как генерация или рекомбинация электрона сопровождается появлением или исчезновением одного иона (при рассматриваемой температуре учитываются только однозарядные положительные ионы).

Зависимость неравновесной добавки от потенциала была определена в [7]:

$$\delta n = n_0 \frac{\exp \Phi - 1}{2 \cosh \Phi - 1},$$

откуда следуют распределения для электронов и ионов [8]:

$$n_e = n_0 \frac{\exp(2\Phi)}{2 \cosh \Phi - 1}, \quad (10a)$$

$$n_i = n_0 \frac{\exp(-2\Phi) + 2 \sinh \Phi}{2 \cosh \Phi - 1}, \quad (10b)$$

где  $\Phi = e\varphi / kT$  - безразмерный потенциал.

В невозмущенной области плазмы вдали от частицы выполняется условие нейтральности (3) и невозмущенная концентрация по-прежнему определяется уравнением (4). У поверхности частицы концентрация электронов определяется уравнением (7), что позволяет определить потенциальный барьер, используя (10a):

$$\frac{n_0}{n_{es}} \exp\left(\frac{3V_b}{k_B T}\right) - \exp\left(\frac{2V_b}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{V_b}{k_B T}\right) - 1 = 0 \quad (11)$$

Нейтральность всего объема плазмы при наличии заряженных частиц определяется как

$$Zn_p = \bar{n}_e - \bar{n}_i, \tag{12}$$

где  $Z$  – средний заряд частиц в элементарных зарядах;  $n_p$  – их средняя концентрация;  $\bar{n}_e$  и  $\bar{n}_i$  – средние по всему объему значения электронной и ионной концентраций.

Средние значения концентраций можно вычислить, определив количество носителей заряда, приходящихся на одну частицу, т.е. рассчитав интегралы от распределений (10) по ячейке Вигнера-Зейтцы, которая определяется сферой радиуса  $R_w = (3 / 4\pi n_p)^{1/3}$ , описанной вокруг частицы:

$$N_{eW} = 4\pi \int_a^{R_w} r^2 n_e dr, \quad N_{iW} = 4\pi \int_a^{R_w} r^2 n_i dr. \tag{13}$$

Тогда средние по всему объему значения электронной и ионной концентраций равны:  $\bar{n}_e = N_{eW} n_p$  и  $\bar{n}_i = N_{iW} n_p$ . Однако, для вычисления (13) необходимо знать пространственное распределение потенциала.

Распределение потенциала в окрестности частицы, вообще говоря, неизвестно, так как неизвестно решение сферически симметричного уравнения Пуассона-Больцмана [6]. В плоском случае решением является функция [5]

$$\Phi(r) = 2 \ln \left( \frac{1 + \tanh \frac{\Phi_s}{4} \cdot \exp \frac{a-r}{r_D}}{1 - \tanh \frac{\Phi_s}{4} \cdot \exp \frac{a-r}{r_D}} \right) = 4 \operatorname{atanh} \left( \tanh \frac{\Phi_s}{4} \cdot \exp \frac{a-r}{r_D} \right), \tag{14}$$

где  $\Phi_s = V_b / kT$  – безразмерная высота барьера;  $r_D = \sqrt{kT / 8\pi e^2 n_0}$  – длина экранирования (дебаевский радиус).

Анализ численного решения сферически симметричного уравнения Пуассона-Больцмана позволил на основе (14) сконструировать функцию, которая хорошо коррелирует с этим численным решением:

$$\Phi(r) = \left( 4 + \frac{r_D}{a} \right) \cdot \operatorname{atanh} \left( \tanh \frac{\Phi_s}{4 + \frac{r_D}{a}} \cdot \frac{a}{r} \exp \frac{a-r}{r_D} \right), \tag{15}$$

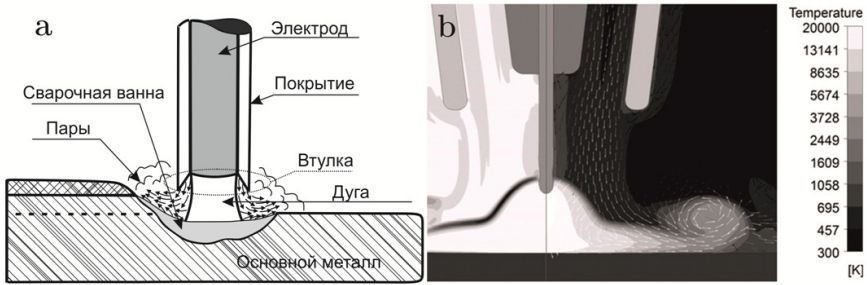
причем, если высота потенциального барьера подчиняется условию

$$\exp \left| \frac{\Phi_s}{2} \right| \leq 10 \frac{r_D}{a}, \tag{16}$$

то функция (15) хорошо совпадает с известным потенциалом Дебая:

$$\varphi(r) = V_b \frac{a}{r} \exp \frac{a-r}{r_D}.$$

**Эволюция концентрации ионов при остывании плазмы сварочного аэрозоля.** Концентрация ионов в плазме сварочного аэрозоля представляет особый интерес, ввиду того, что ионы являются центрами ион-индуцированной нуклеации. При сварке штучными электродами источниками ионов являются



**Рис. 1.** Схема сварки штучным электродом (а) и компьютерное моделирование [9] сварки в защитном газе (б)

атомы щелочных металлов (калий и натрий), которые содержатся в покрытии электрода. Во время сварки металлический стержень электрода выгорает быстрее, чем его покрытие, поэтому образуется втулка, внутри которой происходит ионизация паров (рис. 1а). УФ-излучение дуги интенсивно поглощается щелочной присадкой, поэтому в окружающую среду проникает в основном длинноволновое излучение с энергией фотона  $h\nu < 4.3\text{eV}$  (потенциал ионизации калия), что соответствует длине волны  $\lambda > 288\text{nm}$ .

Таким образом, в окружающую среду истекают уже ионизированные пары. Например, электрод УОНИ 13/55 содержит 3% калия и 6% натрия. Для каждого из металлов щелочной присадки вычисляется своя константа Саха:  $K_S^K$  и  $K_S^{Na}$ . Результирующая равновесная концентрация определяется уравнением (4), где исходные значения концентрации атомов определяются условием формирования паровоздушной смеси в результате смешения паров металлов с окружающим воздухом [11]:

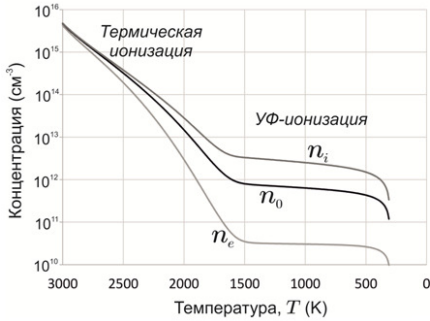
$$n_{Aj} = \frac{P}{kT} \frac{g_j}{\mu_j} \left( \sum_j \frac{g_j}{\mu_j} + \frac{1}{\mu_\infty} \frac{T_0 - T}{T - T_\infty} \right)^{-1}, \quad (17)$$

где  $P$  – атмосферное давление,  $g_j$  – начальная массовая доля  $j$ -того компонента,  $\mu_j$  – его молекулярная масса,  $\mu_\infty$  – молекулярная масса окружающей среды (воздух – при сварке покрытыми электродами, защитный газ – при сварке в защитном газе),  $T_0$  – начальная температура,  $T_\infty$  – температура окружающей среды. Текущая температура рассматриваемой области плазмы сварочного аэрозоля определяется уравнением

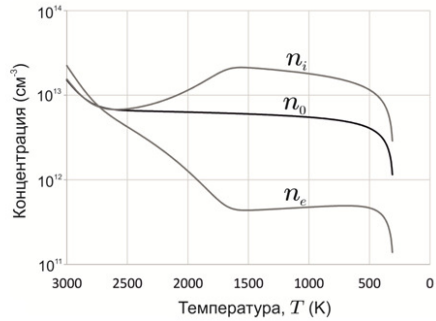
$$T = T_\infty + (T_0 - T_\infty) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (18)$$

где  $\tau$  – постоянная времени смешения (определяется экспериментально).

Зависимость концентрации атомов щелочной присадки от температуры определяется из уравнений (17), зависимость равновесной невозмущенной концентрации – уравнением (4) и зависимости концентрации электронов и ионов –



**Рис. 2.** Зависимости концентраций электронов и ионов от температуры паровоздушной смеси, при сварке штучными электродами (концентрация частиц  $n_p = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ )

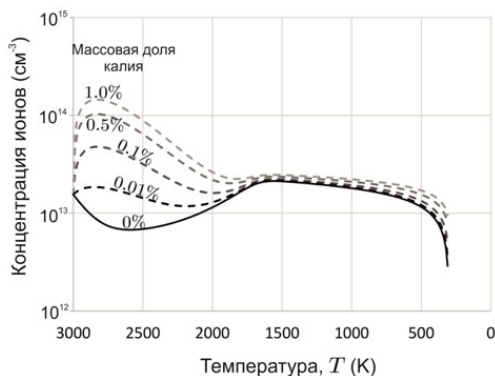


**Рис. 3.** Зависимости концентраций электронов и ионов от температуры парогазовой смеси, при сварке в защитном газе (концентрация частиц  $n_p = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ )

уравнениями (13) с учетом отклонения от равновесия в ОПЗ (10). Результирующие зависимости концентраций электронов и ионов от температуры паровоздушной смеси, образующейся при сварке штучными электродами, представлены на рис.2. Из расчетов следует, что отклонение от равновесия увеличивается с понижением температуры смеси, когда определяющую роль начинает играть УФ-ионизация. На рис.3 представлены зависимости концентраций электронов и ионов от температуры парогазовой смеси, образующейся при сварке в защитном газе для следующего исходного компонентного состава паров: железо –  $g_{Fe} = 0.91$ , марганец –  $g_{Mn} = 0.07$ , кремний –  $g_{Si} = 0.015$ , медь –  $g_{Cu} = 0.005$ .

При сварке в защитном газе влияние неравновесной ионизации выше, чем при сварке покрытыми электродами. Это обусловлено низкой равновесной степенью ионизации. При больших значениях потенциала ионизации атомов уравнение (8) дает величину поверхностной ионизации гораздо меньшую, чем при потенциале ионизации щелочных атомов. Это приводит к более заметному отклонению от равновесия за счет добавок к концентрации  $\delta n$  (9).

Если в защитный газ ввести щелочную присадку, то концентрация ионов в парогазовой смеси увеличится. Зависимости концентрации ионов от температуры парогазовой смеси для разного содержания калия в защитном газе приведены на рис.4. В начальный момент времени (при температуре 3000 К) смешения еще нет, и концентрация ионов определяется начальным составом паров. Однако по мере смешения паров с защитным газом, происходит увеличение концентрации ионов за счет ионизации атомов калия. Даже очень низкое содержание щелочной присадки (0.01%) приводит к существенному увеличению концентрации ионов и, соответственно, электронов, что должно оказывать воздействие на процессы нуклеации и роста зародышей.

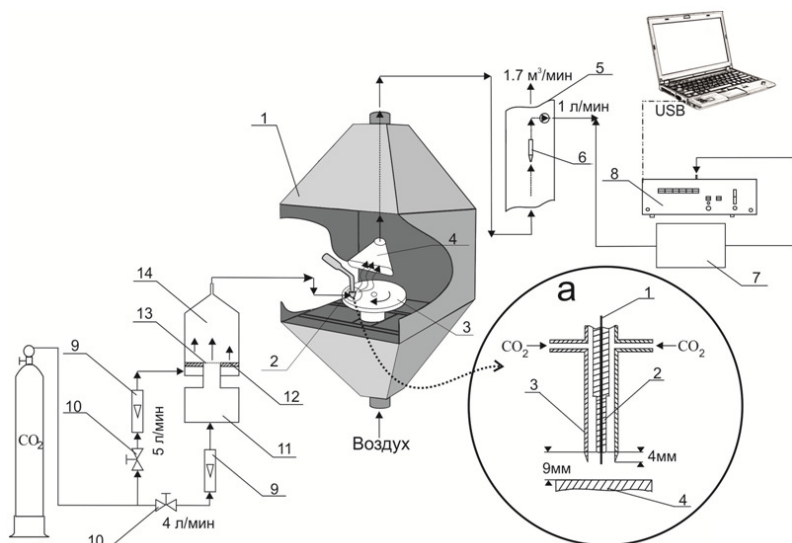


**Рис. 4.** Зависимости концентрации ионов от температуры парогазовой смеси, при сварке в защитном газе с присадкой калия (концентрация частиц  $n_p = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ )

**Экспериментальное исследование влияния содержания щелочной присадки в защитном газе на дисперсный состав сварочного аэрозоля.** Для изучения влияния содержания присадок калия в защитном газе была использована экспериментальная установка, схема которой представлена на рис.5. Сварочный аэрозоль получали в сварочной камере в процессе наплавки металла на вращающийся (1об/мин) диск (диаметр 180 мм, толщина 12 мм) из низкоуглеродистой стали Ст3 полуавтоматом инверторного типа «Патон ПСИ-250P DC MMA/MIG/MAG».

Параметры режима наплавки электродной проволокой Св08Г2С диаметром 0,8мм: обратная полярность (электродная проволока является положительным, а наплавляемый диск - отрицательным полюсами), постоянный ток  $95 \pm 5 \text{ А}$  и напряжение  $20 \pm 0,2 \text{ В}$ , скорость подачи проволоки  $8,6 \pm 0,1 \text{ см/с}$ . Во всех опытах поддерживали постоянными расстояние между контактным наконечником и наплавляемым диском (9 мм) и угол ( $90^\circ$ ), измеренный между диском и осью проволоки.

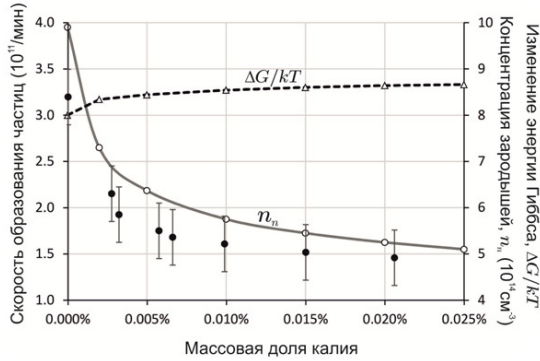
Введение присадки калия в защитный газ ( $\text{CO}_2$ ) осуществляли при помощи пневматического медицинского небулайзера (Vega Technologies Inc.) с сеткой из нержавеющей стали (размер ячеек 100 мкм). Для распыления водного раствора карбоната калия использовался поток (4 л/мин) сухой двуокиси углерода. Образующийся при распылении аэрозоль (средний диаметр капель  $\approx 6 \text{ мкм}$ ), поступал в камеру смешения/сушки через центральное отверстие пористой пластины из нержавеющей стали. Для уплотнения пористой пластины по периметру и в центральном отверстии использовались тефлоновые кольца. Дополнительный спутный поток сухой двуокиси углерода (5 л/мин) вводился в камеру смешения/сушки ниже пористой пластины. Дополнительный поток необходим для обеспечения рекомендуемого потока защитного газа в процесса сварки, сушки капель раствора, и транспортировки полученного аэрозоля час-



**Рис. 5.** Схема экспериментальной установки: 1 – сварочная камера; 2 – сварочная горелка; 3 – вращающийся диск для наплавки металла; 4 – щелевой воздухозаборник; 5 – вертикально расположенная труба; 6 – наконечник пробоотборной трубки для изокINETического отбора проб; 7 – аэрозольный разбавитель; 8 – лазерный аэрозольный спектрометр; 9 – газовые ротаметры; 10 – газовые краны; 11 – небулайзер (распылитель) раствора карбоната калия; 12 – пористая пластина из нержавеющей стали; 13 – сетка из нержавеющей стали; 14 – камера смешения/сушки. Рис.5а Схема сварочной горелки: 1 – электродная проволока; 2 – контактный наконечник; 3 – газовое сопло сварочной горелки (внутренний диаметр 15 мм); 4 – диск для наплавки металла

тиц карбоната калия в газовое сопло сварочной горелки с минимальными потерями на осаждение в магистрали подачи защитного газа.

Массовый расход раствора в процессе распыления определяли путем измерения изменения массы небулайзера за время каждого испытания. Концентрацию присадки калия в защитном газе варьировали путем изменения концентрации карбоната калия в водном растворе в диапазоне 1÷25%. При измерениях счетной концентрации частиц сварочного аэрозоля использовался аэрозольный разбавитель с коэффициентом разбавления 230 для расхода потока пробы 1 л/мин. Дисперсный состав аэрозоля измеряли с помощью лазерного аэрозольного спектрометра ЛАС-П с каналами (мкм): 0.15-0.2; 0.2-0.25; 0.25-0.3; 0.3-0.4; 0.4-0.5; 0.5-0.7; 0.7-1.0; 1.0-1.5; >1.5 (Научно-исследовательский физико-химический институт имени Карпова, модель 9814.290.000). Измеренная с помощью ЛАС-П счетная концентрация ( $1/\text{см}^3$ ) частиц сварочного аэрозоля в пробе, пересчитывалась на скорость образования (1/мин) частиц в процессе сварки, принимая во внимание расход воздуха  $1,7 \text{ м}^3/\text{мин}$ , удаляемого из сварочной камеры, и коэффициент разбавления пробы [12]. Результаты измерений



**Рис. 6.** Влияние массовой доли калия в защитном газе на скорость образования частиц сварочного аэрозоля

в зависимости от процентного содержания калия в защитном газе представлены на рис. 6.

Сварочный аэрозоль образуется в результате гетерогенной ион-индуцированной нуклеации в парогазовой среде, насыщенной электронами. Поэтому, обмен зарядами и энергией между зародышами и средой влияет на процесс нуклеации. В работах [2, 13] было предложено следующее выражение для описания изменения свободной энергии Гиббса при нуклеации:

$$\Delta G = 4\pi r_n^2 \sigma - \frac{4}{3} \pi r_n^3 \frac{\rho k T \ln S}{m_a} + E_\sigma + E_{ex} + E_q, \quad (19)$$

где  $r_n$  – радиус зародыша,  $\sigma = \sigma_0 r_n / (r_n + 2\delta)$  – поверхностное натяжение капли зародыша,  $\sigma_0$  – поверхностное натяжение плоской поверхности,  $\delta$  – длина Толмена,  $m_a$  – атомная масса конденсирующегося вещества,  $\rho$  – его плотность,  $S$  – перенасыщение конденсирующегося пара в парогазовой смеси.

Первые два члена в правой части уравнения (19) описывают классическую гомогенную нуклеацию. Величина  $E_\sigma$  – изменение поверхностного натяжения в результате образования двойного слоя в капле зародыша, которое в кулоновском приближении определяется как

$$E_\sigma \cong -\frac{Z_n V_b}{2},$$

где  $Z_n$  – заряд зародыша.

Величина  $E_{ex}$  – изменение свободной энергии в результате передачи энергии электроном при поглощении или эмиссии электрона:

$$E_{ex} = -Z_n \left( W_n + \frac{3}{2} kT \right),$$

где  $W_n$  – работа выхода.

Величина  $E_q$  – изменение свободной энергии в результате обмена зарядами, которое для проводящего зародыша определяется как

$$E_q = \frac{e^2}{2} \left( \frac{Z_n^2}{r_n} + \frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_i} \right),$$

где  $r_i$  – радиус иона.

Концентрация равновесных зародышей с радиусом  $r_n = r_{eq}$ , которая определяется минимумом функции  $\Delta G(r_n)$ , равна [2]

$$n_n = \frac{n_{a0}}{N_{an} + N_{an}^{-3/2} \exp \frac{\Delta G(r_{eq})}{kT}}, \quad (20)$$

где  $n_{a0}$  – исходная концентрация конденсирующихся атомов,  $N_{an}$  – количество атомов в зародыше:  $N_{an} = 4\pi\rho r_n^3 / 3m_a$ .

Зависимость концентрации зародышей (20) от массовой доли калия в защитном газе среде также представлена на рис.6. С увеличением доли калия концентрация зародышей уменьшается, что определяется межфазным взаимодействием в процессе нуклеации, которое приводит к росту отрицательного заряда зародыша с увеличением концентрации электронов в парогазовой среде. Увеличение концентрации электронов приводит к росту членов  $E_\sigma$ ,  $E_{ex}$ ,  $E_q$  в уравнении (19) и, соответственно, к увеличению изменения свободной энергии Гиббса в процессе нуклеации  $\Delta G$ , что также продемонстрировано на рис.6. Как следует из (20), увеличение  $\Delta G(r_{eq})$  приводит к снижению концентрации зародышей.

Исходная концентрация зародышей определяет все остальные процессы, происходящие при формировании агломератов первичных частиц – ингаляционных частиц сварочного аэрозоля, в том числе и скорость их образования при сварке в защитном газе. Корреляция между скоростью образования частиц сварочного аэрозоля и исходной концентрацией зародышей хорошо видна на рис.6.

**Заключение.** Поверхность заряженных конденсированных частиц является причиной смещения ионизационного равновесия в плазме, которое влияет на среднюю концентрацию электронов и ионов в плазме. Это самосогласованный процесс, так как концентрации носителей заряда определяют заряд зародышей, а заряд зародышей влияет на сам процесс нуклеации, т.е. на размер и концентрацию зародышей.

Добавление присадки калия в защитный газ приводит к увеличению концентрации носителей заряда в плазме сварочного аэрозоля, что вызывает увеличение отрицательного заряда зародышей и рост изменения свободной энергии Гиббса при нуклеации. Это является причиной уменьшения концентрации зародышей и, соответственно, уменьшения скорости образования ингаляционных частиц сварочного аэрозоля.



Таким образом, введение незначительных присадок калия (менее 0,1%) в защитный газ позволяет минимизировать негативное воздействие сварочного аэрозоля на здоровье сварщиков, также приводит к поглощению коротковолнового УФ-излучения дуги и способствует снижению интенсивности образования токсичного озона в процессе сварки.

### Литература:

1. Вишняков В.И., Киро С.А., Опря М.В., Эннан А.А. Образование твердой составляющей сварочного аэрозоля. Часть V. Формирование конечных агломератов. // Физика аэродисперсных систем. - 2014. - Вып. 51. - С. 87-98
2. Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Ennan, A.A. Formation of primary particles in welding fume // Journal of Aerosol Science. – 2013. - V. 58. - P. 9-16.
3. Pal' A.F., Starostin A.N., Filippov A.V. Charging of dust grains in a nuclear-induced plasma at high pressures // Plasma Physics Reports. – 2001. - V. 27(2). - P. 143-152.
4. Dresser M.J. The Saha-Langmuir equation and its application // Journal of Applied Physics. – 1968. - V. 39. - P. 338-339.
5. Vishnyakov V.I., Dragan, G.S. Electrostatic interaction of charged planes in the thermal collision plasma: Detailed investigation and comparison with experiment // Physical Review E. - 2005. V. 71, 016411(1-9).
6. Vishnyakov V.I., Dragan G.S., Evtuhov, V.M. Nonlinear Poisson-Boltzmann equation in spherical symmetry // Physical Review E. - 2007. – V. 76, 036402(1-5).
7. Vishnyakov V.I. Interaction of dust grains in strong collision plasmas: Diffusion pressure of nonequilibrium charge carriers // Physics of Plasmas. - 2005. – V. 12, 103502(1-6).
8. Vishnyakov V.I. Electron and ion number densities in the space charge layer in thermal plasmas // Physics of Plasmas. - 2006. – V. 13, 033507(1-4).
9. Vishnyakov V.I., Dragan, G.S. Ordered spatial structures of dust grains in the thermal plasma // Physical Review E. – 2006. - V. 73, 026403(1-7).
10. Dreher M., Füssel U., Schnik M. Simulation of shielding gas flow inside the torch and in the process region of GMA welding // Mathematical Modelling of Weld Phenomena 9, Graz: Verlag der Technischen Universität Graz, 2009. – P. 127-138.
11. Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Oprya M.V., Ennan A.A. Effects of shielding gas temperature and flow rate on the welding fume particle size distribution // Journal of Aerosol Science. – 2017. – V. 114. – P. 55-61.
12. Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Oprya M.V., Shvets O.I., Ennan, A.A. Nonequilibrium ionization of welding fume plasmas; Effect of potassium additional agent on the particle formation // Journal of Aerosol Science. – 2017. – V. 113. – P. 178-188.
13. Vishnyakov V.I., Kiro, S.A., Ennan A.A. Heterogeneous ion-induced nucleation in thermal dusty plasmas // Journal of Physics D: Applied Physics. - 2011. – V. 44, 215201(1-7).

**Вишняков В. І., Опря М. В., Еннан А. А.-А.**

**Вплив лужної присадки у захисному газі на дисперсний склад зварювального аерозолю.**

**АНОТАЦІЯ**

*Досліджено іонізаційний баланс у плазмі зварювального аерозолю при електродуговому зварюванні металів у захисному газі. Присутність конденсованих частинок спричиняє іонізацію атомів газу на поверхні частинок і призводить до зміщення іонізаційного балансу в області просторового заряду навколо частинки. Тому, середні концентрації електронів та іонів у плазмі змінюються в присутні заряджених частинок. Це впливає на процес утворення зародків та, відповідно, змінює швидкість утворення частинок зварювального аерозолю. Виміряні швидкості утворення частинок при різному вмісті домішок калію в захисному газі. Розрахункова концентрація зародків при різному вмісті домішок калію в захисному газі добре корелює з одержаними експериментальними даними.*

**Vishnyakov V.I., Oprya M.V., Ennan A. A.-A.**

***Effect of alkaline additional agent in shielding gas on disperse composition of welding fume.***

**SUMMARY**

*The ionization balance in the welding fume plasma is studied for gas metal arc welding. The presence of condensed particles causes the ionization of gas atoms on the particle surface and leads to ionization balance displacement in the space charge layer around particle. Therefore, the average electron and ion number densities are changed, when charged particles are present in the plasma. It leads to the nucleation process change and, accordingly, influences the fume formation rate. The measured particle formation rates for different potassium additives in the shielding gas are presented. The calculated nuclei number densities for gas metal arc welding with potassium additive, which correlates well with experimental data, are demonstrated.*

УДК 551.508.91

**Шингарёв Г.Л.<sup>1</sup>, Контуш С.М.<sup>1</sup>, Скапцов А.С.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>НИИ физики Одесского национального университета им. П.П.Мечникова

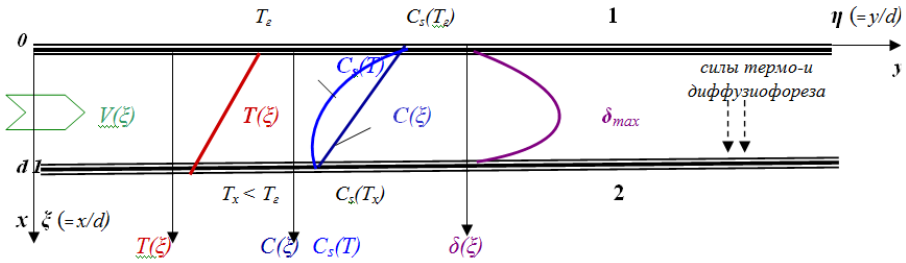
<sup>2</sup>Могилёвский госуниверситет пищевых технологий, кафедра физики  
E-mail: grishin52@gmail.com

### **Малоинерционный способ управления полями температур и пересыщений в термодиффузионных камерах. Опыты по исследованию диффузиофореза.**

*Анализ процессов тепломассопереноса в поточной термодиффузионной камере (ТДК) показал, что изменение температуры дополнительного нагревательного элемента, помещенного внутрь камеры, позволяет за короткое время перестраивать тепловой режим камеры и устанавливать необходимое пересыщение. Предложенный способ управления тепловыми процессами в ТДК положен в основу опытного образца устройства, в ходе экспериментальной проверки которого установлено, что температура нагревательного элемента влияет на распределение температуры в канале камеры и на профиль пересыщения. Экспериментально доказано, что подобное устройство можно использовать как для создания градиентов концентрации пара в условиях однородного температурного поля, так и пересыщения в широком диапазоне значений. ТДК с нагревательным элементом прошла опытную проверку в качестве аэрозольного фильтра и доказала свою высокую эффективность.*

**Введение.** В экспериментальных исследованиях конденсации паров различных веществ на аэрозольных частицах широко используются термодиффузионные камеры – устройства, создающие контролируемые пересыщения паровой компоненты в среде с заданными градиентами температуры и концентрации пара. Наибольшее распространение в физической химии, метеорологии, физике аэрозолей и целом ряде производственных процессов получили динамические (или поточные) термодиффузионные камеры (в дальнейшем ТДК). Так, в экспериментальной метеорологии ТДК используются для определения активности атмосферных ядер конденсации при образовании облаков и туманов, а также анализа процессов вымывания высокодисперсных аэрозолей из атмосферы. В медицине, экологии, микробиологической промышленности проводятся разработки высокоэффективных аэрозольных фильтров на базе ТДК, где осаждение дисперсной компоненты из газовой (воздушной) среды происходит под действием сил термофореза и/или диффузиофореза.

Поточная термодиффузионная камера представляет собой устройство, состоящее из двух поверхностей (коаксиальных цилиндров либо плоскопараллельных пластин) имеющих разную температуру и смоченных какой-либо жидкостью (например, водой). Схематическое изображение камеры представлено на рис.1. Через пространство между поверхностями (позиции **1** и **2**) пропускается аэрозоль, либо воздух (направление течения показано на рис.1 фигурной стрелкой). За счет разной концентрации насыщенных паров вблизи более на-



**Рис. 1.** Схема стандартной динамической термодиффузионной камеры щелевой конфигурации (образуемой пластинами 1 и 2). Верхняя пластина (1), смазываемая водой, имеет температуру  $T_e$  более высокую, чем температура нижней пластины (2)  $T_x$ . На рисунке показаны профили температуры  $T(\xi)$ , концентрации пара  $C(\xi)$ , концентрации насыщенного пара  $C_s(T)$  и пересыщения  $\delta(\xi)$

гретой поверхности (позиция 1) и поверхности, имеющей меньшую температуру (позиция 2), в пространстве между ними возникает пересыщение.

Под пересыщением понимается величина, определяемая выражением:

$$\delta(x, y, z) = \frac{C(x, y, z)}{C_s[T(x, y, z)]} - 1. \quad (1)$$

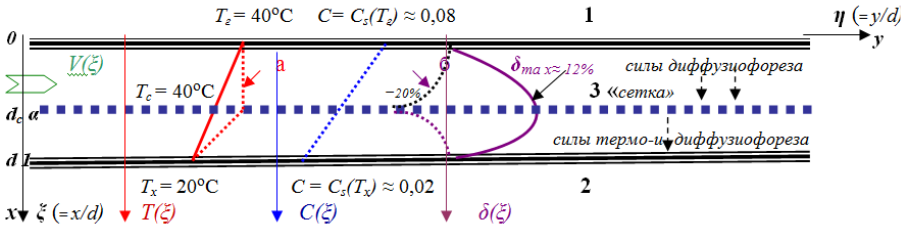
Здесь  $C(x, y, z)$  – концентрация пара в заданной точке пространства;  $C_s(x, y, z)$  – концентрация насыщенного пара в той же точке и при той же температуре. Зависимость концентрации насыщенных паров  $C_s[T(x, y, z)]$  от температуры удовлетворительно описывается формулой Клаузиуса-Клапейрона:

$$C_s[T(x, y, z)] = \exp[A - B/T(x, y, z)] \quad (2)$$

где  $A$  и  $B$  – коэффициенты, зависящие от физических свойств вещества (значения их находятся в справочной литературе).

Для расчета распределения пересыщения  $\delta(x, y, z)$  в пространстве между пластинами необходимо знать поля температуры  $T(x, y, z)$  и концентрации пара  $C(x, y, z)$ . В случае щелевой ТДК, у которой расстояние между пластинами  $d$  много меньше ширины канала, распределения температуры и концентрации пара в первом приближении удовлетворительно описываются линейными функциями (см. зависимости  $T(\xi)$  и  $C(\xi)$  на рис.1, где  $\xi = x/d$  – относительная координата). Ввиду сложного характера зависимости концентрации насыщенных паров от температуры, профиль пересыщения имеет ассиметричный вид (см. кривую  $\delta(\xi)$  на рис.1). Причём, во всех точках пространства между пластинами, за исключением поверхности самих пластин,  $\delta(\xi) > 0$ . В подобном устройстве переход с одного теплового режима на другой, т.е. задание необходимых значений пересыщения, достигается только путем изменения температуры внутренних поверхностей самой камеры.

Детальное рассмотрение процессов, протекающих в ТДК, привели авторов [1,2] к созданию нового вида термодиффузионной камеры с сетчатым нагревательным элементом [3]. В основу управления тепловыми процессами в такой



**Рис. 2.** Схема динамической термодиффузионной камеры с сетчатым нагревательным элементом («сетка», позиция 3)

ТДК, положен способ, аналогичный тому, который был предложен для управления анодным током в трёхэлектродной электронной лампе (триоде). «Катодом» в камере выступает более нагретая стенка с температурой  $T_z$ , с поверхности которой жидкость испаряется. На нижней стенке камеры (аналог «анода») с температурой  $T_x < T_z$  происходит конденсация пара. Роль ламповой «управляющей сетки» в ТДК выполняет сетчатый нагревательный элемент с температурой  $T_c$  (в дальнейшем по тексту «сетка»).

**Конструктивно** поточная ТДК с сеткой (сокращённо ТДКС) представляет собой щелевую ТДК, состоящую из двух плоских параллельных пластин (рис.2 позиции 1 и 2), в пространство между которыми помещен сетчатый нагреватель (рис.2 позиция 3). «Сетка» имеет площадь равную площади пластин и расположена параллельно им. Введение «сетки» разбивает всё пространство камеры на две зоны: «более нагретая стенка – сетка» (зона 1–3, см. рис.2) и «сетка – холодная стенка» (зона 3–2, см. рис.2). Зона 1–3, через которую проходит аэрозоль или газовая смесь (на рис.2 эти потоки показаны фигурной стрелкой), называется рабочей зоной. Размер ячеек сетки подобран таким образом, что она практически не оказывает сопротивления потокам молекул водяного пара и воздуха. Нагревание «сетки» осуществляется путем пропускания по ней электрического тока. Температура сетчатого нагревательного элемента  $T_c$  зависит от степени его нагрева и положения в канале камеры.

Нагревание «сетки» оказывает влияние на профиль температуры в канале камеры. Поскольку распределение концентрации активной компоненты газовой смеси  $C(\xi)$  остается неизменным, то изменение температуры сетки приводит к изменению пересыщения в обеих зонах. Таким образом, использование сетчатого нагревательного элемента позволяет управлять пересыщением в канале ТДКС путем разделения процессов переноса тепла и массы.

Результаты расчета профилей температуры  $T(\xi)$ , концентрации  $C(\xi)$  и пересыщения  $\delta(\xi)$  для системы воздух-водяной пар показаны на рисунке 2 пунктирными линиями для случая, когда температура «сетки»  $T_c$  равна температуре верхней пластины  $T_z$  ( $T_c = T_z = 313$  К). Расчеты выполнены для условий  $T_x = 293$  К,  $T_z = 313$  К. Сплошные линии на том же рисунке соответствуют случаю отсутствия нагрева сетки. Так как распределение концентрации пара  $C(\xi)$  не зависит от температуры «сетки»  $T_c$ , а определяется только температурами пластин  $T_z$  и  $T_x$ ,

то прямая  $C(\xi)$  на рис. 2 совпадает с прямой  $C(\xi)$  на рис. 1 при одинаковых граничных условиях.

При выполнении условия  $T_c = T_s$  активная компонента газовой смеси в обеих зонах является ненасыщенной и, соответственно, пересыщение  $\delta < 0$  (см. пунктирную линию б рис. 2). Такого условия **принципиально невозможно** добиться в обычных термодиффузионных камерах. Еще одной важной особенностью ТДКС является то, что при равенстве температур «сетки» и более нагретой стенки ( $T_c = T_s$ ) в рабочей зоне камеры в условиях однородного температурного поля существует градиент концентрации пара. Создание подобного рода условий предоставляет исследователям принципиальную возможность экспериментально изучать явление диффузиофореза в отрыве от часто сопутствующего ему явления термофореза. В обычных поточных ТДК силы термо-и диффузиофореза, действующие на аэрозольные частицы, неразделимы.

Остановимся более подробно на анализе процессов, протекающих в поточной термодиффузионной камере с «сеткой». Ограничимся рассмотрением одномерной задачи по следующим причинам:

- стенки ТДКС термостатированы, поэтому распределение температуры и концентрации насыщенного пара не зависят ни от времени, ни от продольной координаты  $y$ , ни от поперечной координаты  $z$ ;
- ширина ТДКС (вдоль координаты  $z$ ) значительно больше расстояния между стенками  $d$  (по координате  $x$ ), и влиянием краевых эффектов вблизи боковых поверхностей камеры можно пренебречь;
- искажение поля концентрации пара  $C(\xi)$  за счет конденсационного роста аэрозольных частиц на входе в ТДКС незначительно.

Предположим, что размер ячеек «сетки» сравним с её толщиной, которая, в свою очередь, мала по сравнению с высотой канала ( $h/d \ll 1$ ). «Сетка» не оказывает сопротивления потоку пара, а теплопроводность «сетки» значительно превышает теплопроводность газа. Указанные предположения позволяют считать температуру «сетки» постоянной по её толщине и равной  $T_c$ .

Ниже описан изготовленный макетный образец ТДКС с высотой канала равной  $d = 15 \cdot 10^{-3}$  м (1500 мкм). Никелевая «сетка» имеет толщину  $h = 50 \cdot 10^{-6}$  м (50 мкм  $\ll$  1500 мкм) и ячейки размером – 25 мкм  $\times$  25 мкм. Приведенные характеристики сетки полностью укладываются в рамки сделанных предположений.

Если не учитывать естественную конвекцию, явления термодиффузии и диффузионной теплопроводности, то уравнения переноса тепла и массы для двух областей канала камеры (зона 1–3 и зона 3–2, см. рис.2) с соответствующими граничными условиями можно представить в виде

$$\Delta T = 0 \quad \xi \in [0, \alpha], \quad (3)$$

$$\Delta T = 0 \quad \xi \in [\alpha, 1], \quad (4)$$

$$\xi = 0 \quad T(0) = T_s; \quad (5)$$

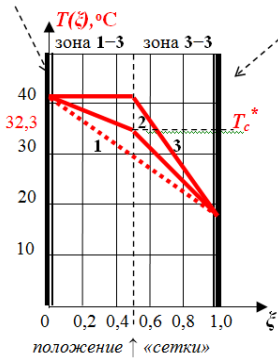
$$\xi = \alpha \quad T(d_c) = T_c; \quad (6)$$

$$\xi = 1 \quad T(d) = T_s; \quad (7)$$

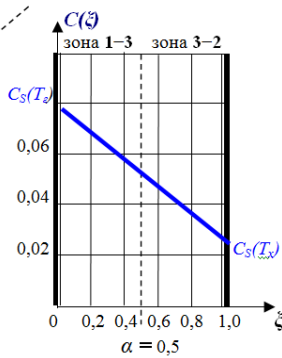
$$\Delta C = 0 \quad \xi \in [0, \alpha], \quad (8)$$

$$\Delta C = 0 \quad \xi \in [\alpha, 1], \quad (9)$$

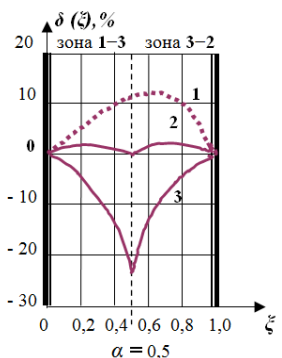
$$\xi = 0 \quad C(0) = C_s(T_s); \quad (10)$$



**Рис. 3а.** Профили температуры в ТДКС,  $\alpha = 0,5$



**Рис. 3б.** Распределение концентрации пара в ТДКС



**Рис. 3в.** Кривые пересыщения в ТДКС

**Рис.3.** Пространственные распределения температуры, концентрации пара и пересыщения в ТДКС для смеси «воздух – водяной пар» при расположении «сетки» в середине камеры ( $\alpha=0,5$ ). Зависимости, обозначенные цифрой **1**, соответствуют случаю работы обычной ТДК без «сетки». Графики **2** – нагрев «сетки» до критической температуры  $T_c^* = 32,3^\circ\text{C}$ . Зависимости **3** – нагрев «сетки» до температуры наиболее нагретой стенки камеры  $T_c = T_z = 40^\circ\text{C}$ .

$$\xi \in [0,1] \quad J = -D \cdot n \cdot S \cdot \Delta C, \quad (11)$$

$$\xi = 1 \quad C(d) = C_s(T_x). \quad (12)$$

Здесь  $\Delta T \equiv \frac{\partial^2 T(\xi)}{\partial \xi^2}$ ,  $\Delta C \equiv \frac{\partial^2 C(\xi)}{\partial \xi^2}$ , где  $\xi = \frac{x}{d}$ ,  $\alpha = \frac{d_c}{d}$ ,  $d_c$  – координата сетки,

$C = n/n_{\text{бс}}$  – относительная концентрация ( $n$  и  $n_{\text{бс}}$  – численные концентрации молекул пара и бинарной газовой смеси),  $J$  – диффузионный поток молекул паровой компоненты смеси в каждой из зон ТДКС;  $D$  – коэффициент диффузии пара в газе;  $S$  – площадь поперечного сечения ТДК.

Решая систему уравнений (3)–(4) и (8)–(9) с граничными условиями (5)–(7) и (10)–(12), можно найти распределение температуры  $T(\xi)$  и концентрации пара  $C(\xi)$ , а затем рассчитать профили пересыщения  $\delta(\xi)$ . Следует заметить, что в рамках сделанных предположений, уравнения переноса тепла и массы являются независимыми. Поэтому изменение температуры «сетки»  $T_c$  не влияет на процесс массопереноса, а распределение концентрации пара в канале ТДКС для любой зоны описывается выражением вида:

$$C(\xi) = C_s(T_z) - [C_s(T_r) - C_s(T_x)] \cdot \xi \quad (13)$$

На рис.2 и рис.3б показан профиль  $C(\xi)$ , рассчитанный по формуле (13), где в качестве примера выбраны граничные условия  $T_z = 313 \text{ K}$  и  $T_x = 293 \text{ K}$ .

Решение уравнений по нахождению профилей  $T(\xi)$  и  $\delta(\xi)$  для различных зон ТДКС будут иметь следующий вид:

для зоны **1 – 3**, где  $\xi \in [0, \alpha] \rightarrow T(\xi) = T_r - \frac{T_r - T_c}{\alpha} \cdot \xi$  (14)

$$\delta(\xi) = \frac{C(\xi)}{C_s \left( T_c - \frac{T_c - T_c}{\alpha} \cdot \xi \right)} - 1 \quad (15)$$

для зоны **3 – 2**, где  $\xi \in [\alpha, 1] \rightarrow T(\xi) = \frac{T_c - T_x \cdot \alpha}{1 - \alpha} - \frac{T_c - T_x}{1 - \alpha} \cdot \xi$  (16)

$$\delta(\xi) = \frac{C(\xi)}{C_s \left( \frac{T_c - T_x \cdot \alpha}{1 - \alpha} - \frac{T_c - T_x}{1 - \alpha} \cdot \xi \right)} - 1. \quad (17)$$

Выражения (15) и (17) справедливы в том случае, если температура «сетки»  $T_c$  не ниже некоторой критической температуры  $T_c^*$ , при которой на ней начинается конденсация пара. Величина  $T_c^*$  может быть найдена из условия отсутствия конденсации пара на поверхности «сетки» (условие  $\delta(\xi = \alpha) \leq 0$ ):

$$T_c^* = T_c \left\{ 1 - \frac{T_c}{B} \ln \left[ 1 + \alpha \left( \frac{C_s(T_c)}{C_s(T_x)} - 1 \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (18)$$

где  $B$  – коэффициент в выражении (2) зависимости концентрации насыщенных паров от температуры.

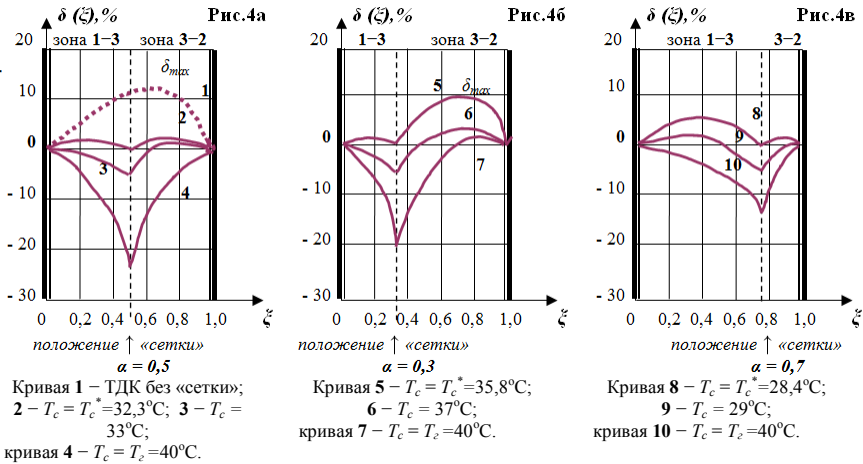
Нетрудно показать, что уравнения (13)–(17) переходят в известные распределения температуры, концентрации пара и пересыщения в рабочей зоне ТДКС без сетчатого нагревательного элемента.

Проиллюстрируем графической интерпретацией расчёты некоторых характерных режимов ТДКС. На рис.3 показаны профили  $T(\xi)$ ,  $C(\xi)$  и  $\delta(\xi)$  для смеси «воздух-водяной пар» в случае, когда «сетка» расположена в середине ТДКС ( $\alpha = 0,5$  и координата  $\xi = 0,5$ ). Для удобства восприятия графики, рабочий объём ТДКС показан при вертикальном положении. Температурные режимы стенок камеры в расчётах задавались следующими:  $T_c=313$  К (на рис.3 левая стенка, более нагретая) и  $T_x=293$  К (правая стенка ТДКС).

Проиллюстрируем графической интерпретацией расчёты некоторых характерных режимов ТДКС. На рис.3 показаны профили  $T(\xi)$ ,  $C(\xi)$  и  $\delta(\xi)$  для смеси «воздух-водяной пар» в случае, когда «сетка» расположена в середине ТДКС ( $\alpha = 0,5$  и координата  $\xi = 0,5$ ). Для удобства восприятия графики, рабочий объём ТДКС показан при вертикальном положении. Температурные режимы стенок камеры в расчётах задавались следующими:  $T_c=40^\circ\text{C}$  (на рис.3 левая стенка, более нагретая) и  $T_x=20^\circ\text{C}$  (правая стенка ТДКС).

Из графиков видно, что во всех зонах ТДКС увеличение температуры «сетки» приводит к уменьшению величины пересыщения и появлению отрицательных величин  $\delta(\xi)$ . Таким образом, путём изменения температуры сетки можно практически безинерционно управлять тепловым режимом камеры и





**Рис. 4.** Профили пересыщения в ТДКС в зависимости от температуры сетчатого нагревательного элемента  $T_c$  и его местоположения (параметра  $\alpha$ )

создавать пересыщения в широком диапазоне значений, включая область  $\delta(\xi) < 0$ , чего принципиально невозможно добиться в обычных ТДК.

Анализ результатов расчётов позволяет выбрать оптимальный режим эксплуатации ТДКС (см. рисунки 3 и 4). Повышение  $T_c$  относительно  $T_c^*$  приводит к уменьшению пересыщения (рис.3в и 4) вплоть до отрицательных величин. Смещение «сетки» ближе к «холодной стенке» ТДКС ( $\alpha = 0,7$ ) увеличивает максимальное значение пересыщения  $\delta_{max}$  в зоне 1-3 (рис. 4в кривая 8). Из графиков видно, что из наибольшее значение  $\delta_{max}$  достигается в зоне 3-2 когда  $\alpha = 0,3$  при минимальной температуре «сетки», равной критической  $T_c = T_c^*$  (кривая 5 рис.4б). Следовательно, для наибольшего расширения диапазона положительных пересыщений, создаваемых в ТДКС, необходимо сетчатый нагревательный элемент помещать ближе к наиболее нагретой поверхности камеры и в качестве рабочей зоны выбирать пространство между менее нагретой стенкой и «сеткой».

**Опыты с ТДКС.** На макетном образце ТДКС, сконструированном авторами [4], были проведены комплексные исследования движения высокодисперсного аэрозоля в поле градиента концентрации водяного пара (см. рис.5а и рис.5б). Эти эксперименты [5] имели в своей основе концепцию использования ТДКС как «абсолютный» фильтр, где по измеряемому «критическому» расходу  $Q^*$  воздуха, несущего высокодисперсные частицы заданных размеров через зону (1 – 3) ТДКС (см. рис.2), можно было рассчитывать искомые величины (например, скорость диффузиофореза). Под  $Q^*$  понимался такой расход, когда аэрозольные частицы, двигаясь в камере под действием сил диффузиофореза к менее нагретой стенке, где происходит конденсация пара, полностью осаждаются на ней (условия т.н. «нулевого проскока» или «полного захвата» аэрозо-

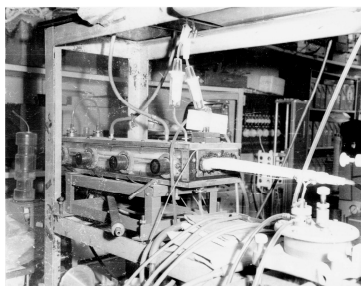


Рис. 5а. Макетный образец ТДКС

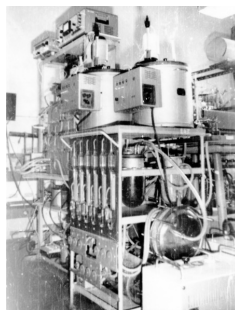


Рис. 5б. Лабораторный стенд для испытания «абсолютного» аэрозольного фильтра

ля). Значения  $Q^*$  определялись измерителем расхода воздуха по качественной методике с использованием стандартной ТДК, представлявшей собой (в данных опытах) камеру-индикатор для проявления высокодисперсного аэрозоля, проскочившего ТДКС.

Наблюдения «темнопольным» методом за аэрозолем на выходе из «индикаторной» ТДК (последовательно соединённой с ТДКС) проводились при различных температурных режимах ТДКС (с условием  $T_c = T_s$ ). В «индикаторной» ТДК устанавливались достаточно высокие пересыщения для проявления (обводнения) ядер конденсации, т.е. того высокодисперсного аэрозоля, который проскочил через ТДКС.

Варьированием потока воздуха через камеры определялся такой расход  $Q^*$ , когда концентрация проявившегося в стандартной ТДК обводнённого аэрозоля была близкой к нулевой (не наблюдались частицы при темнопольном освещении), т.е. происходил полный захват частиц камерой-фильтром.

**Выводы.** Термодиффузионная камера с сетчатым нагревательным элементом обладает определёнными преимуществами по сравнению с обычной ТДК, которые заключаются в следующем:

- широкий диапазон создаваемых пересыщений, вплоть до отрицательных величин;
- быстрая перестройка режимов работы камеры путём изменения температуры «сетки»;
- создание градиентов концентрации пара в условиях постоянной температуры.

В результате проведенных исследований:

- предложен малоинерционный способ управления пересыщением, который реализован в термодиффузионной камере с сетчатым нагревательным элементом. Такая камера может использоваться не только как устройство для создания градиентов концентрации пара и пересыщений в широком диапазоне значений, но и как «абсолютный» аэрозольный фильтр;
- показано, что скорость очистки воздуха от аэрозольных частиц в таком фильтре не зависит ни от концентрации частиц, ни от их размеров, прямо пропорциональна градиенту концентрации пара. Однако, производитель-

ность очистки обратно пропорциональна паросодержанию  $\langle C \rangle = [C_s(T_z) - C_s(T_x)]/2$ , которое тем меньше, чем ниже средняя температура в камере  $\langle T \rangle = (T_z - T_x)/2$ ;

- установлено, что «абсолютный» фильтр на основе ТДКС отличается высоким энергопотреблением и его оптимально использовать в таких условиях, где есть избыточное тепло, например, для очистки топочных газов, имеющих повышенную температуру, или доочистки их после промышленных электрофильтров.

### Литература:

1. *Липатов Г.Н., Контуш С.М.* Течение паро-газовой смеси в плоском щелевом канале. Расчёт полей температуры и концентрации пара // *Физика аэродисперсных систем.* – 1975. Вып. 12, – С. 102-107.
2. *Шингарёв Г.Л.* Процессы тепло-массопереноса и движение аэрозольных частиц в поточных термодиффузионных камерах: дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.14 / *Шингарёв Григорий Леонидович.* – Одесса, 1989. – 145 с.
3. А. с. 859983 СССР, М.Кл<sup>3</sup> G 01 W 1/00. Термодиффузионная камера / *Г.Н.Липатов, Г.Л.Шингарёв* (СССР). – № 2855620/18-10 ; заявл. 17.12.79 ; опубл. 30.08.81, Бюл. №32. – 7 с. : ил.
4. А. с. 1068149 СССР, кл В 01 D 45/18. Устройство для очистки газов от аэрозольных включений / *Г.Н.Липатов, Г.Л.Шингарёв, А.С.Скапцов* (СССР). – № 3244079/23-26 ; заявл. 29.01.81 ; опубл. 23.01.84, Бюл. №3. – 4 с. : ил.
5. *Скапцов А.С.* Движение частиц высокодисперсного аэрозоля в поле градиента концентрации водяного пара: дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.14 / *Скапцов Андрей Сергеевич.* – Одесса, 1984. – 116 с.

*Shynharov G.L., Kontush S.M., Skaptsov A.S.*

**A low inertia way of controlling the temperature and supersaturations fields in the thermidiffusion chambers. Experiments for research of the diffusio-phoresis.**

### SUMMARY

*As a result of detailed consideration of the processes taking place in the flow thermidiffusion chambers (TDC), a new method for controlling the temperature fields in the TDC, which was approved with the help of a model chamber sample, was proposed. Based on the significant experimental material, it is shown that this method is effectively realized in the model version of the TDC. Such a device can be used not only as a system for creating gradients of vapor concentration and supersaturation in a wide range of values (up to negative values, which is fundamentally impossible for standard TDCs), but also as an "absolute" aerosol filter with 100% efficiency of the filtration process.*

**Шингарьов Г.Л., Контуш С.М., Скапцов А.С.**

**Малоінерційний спосіб управління полями температур і пересичень в термодифузійних камерах. Експерименти з дослідження дифузіїфореза**

**АНОТАЦІЯ**

*В результаті детального розгляду процесів, що протікають в поточних термодифузійних камерах (ТДК), запропоновано новий спосіб управління полями температур в ТДК, апробований за допомогою макетного зразка камери. На підставі значного експериментального матеріалу показано, що цей спосіб ефективно реалізується в модельному варіанті ТДК. Такий пристрій може використовуватися не тільки як система для створення градієнтів концентрації пара і пересичення в широкому діапазоні значень (аж до негативних величин, що принципово неможливо для стандартних ТДК), але і як «абсолютний» аерозольний фільтр зі 100% -ю ефективністю процесу фільтрації.*

УДК: 621.791; 533.9

**Киро С. А., Опря М. В., Эннан А. А.-А.**

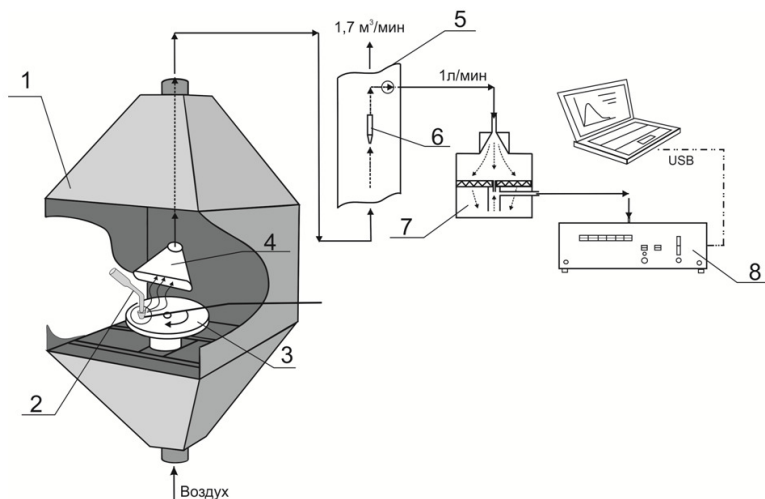
*Фізико-хімічний інститут захисту оточуючої середовища і людини, г. Одеса  
E-mail: serkiro1955@gmail.com*

### **Влияние параметров режима электродуговой сварки в защитном газе на дисперсный и химический состав частиц сварочного аэрозоля.**

*Рассмотрено влияние параметров режима сварки на дисперсный состав ингаляционных частиц, образующихся при электродуговой сварке в защитном газе (СО<sub>2</sub>). Показаны зависимости бимодального распределения частиц по размеру от отношения энергии сварочной дуги к объему расходуемой электродной проволоки в диапазоне от 40 до 70 кДж/см<sup>3</sup>. Представлены результаты измерений элементного состава и удельной поверхности мод ингаляционных частиц сварочного аэрозоля.*

**Введение.** При электродуговой сварке металлов образуются токсичные аэродисперсные частицы – твердая составляющая сварочного аэрозоля (ТССА), проникающую способность которой в органы дыхания связывают с дисперсным составом, а биологическую активность – с химическим составом и удельной поверхностью ингаляционных частиц [1]. Действующая методология оценки вредного воздействия ТССА на здоровье сварщиков и состояние окружающей среды, основана только на сравнении содержания токсичных компонентов ТССА в воздухе рабочей зоны (по валовым показателям) с соответствующими ПДК [2]. Разнообразие размеров, форм и химических составов ингаляционных частиц [3-5] при этом не учитывается, хотя в лёгких человека частицы разных размеров и формы осаждаются с различной эффективностью [6]. Поэтому, исследования, позволяющие проследить взаимосвязь дисперсного состава ингаляционных частиц и технологических параметров режима сварки, имеют большое прикладное значение. Однако, такие данные в научной литературе практически не представлены или вообще отсутствуют, если речь идет о взаимосвязи химического и дисперсного состава, удельной поверхности частиц ТССА. Предыдущие исследования образования ТССА при электродуговой сварке металлов в защитном газе показали, что дисперсный состав зависит от свойств защитного газа, в частности, установлено, что расход защитного газа не влияет на дисперсный состав ТССА, а увеличение температуры защитного газа (в диапазоне от 300 до 600К) приводит к укрупнению и уменьшению счетной концентрации ингаляционных частиц в зоне дыхания сварщика [7, 8].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния технологических параметров режима сварки на дисперсный состав ингаляционных частиц, образующихся при электродуговой сварке углеродистых и низколегированных сталей в защитном газе (СО<sub>2</sub>), а также представлены результаты измерений химического состава и удельной поверхности фракций ТССА.

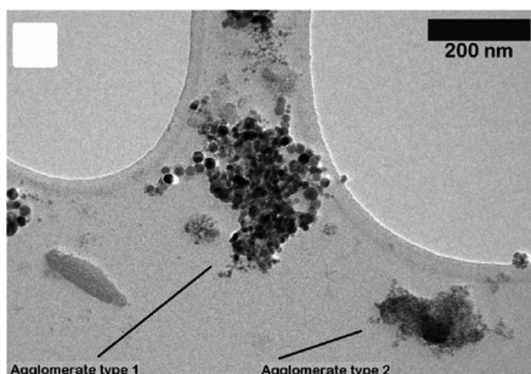


**Рис. 1.** Схема экспериментальной установки: 1 – сварочная камера; 2 – сварочная горелка; 3 – вращающийся диск для наплавки металла; 4 – щелевой воздухозаборник; 5 – вертикально расположенная труба; 6 – наконечник прободоотборной трубки для изокINETического отбора проб; 7 – аэрозольный разбавитель; 8 – лазерный аэрозольный спектрометр

**Экспериментальная установка.** На рис.1 показана принципиальная схема экспериментальной установки, которая использовалась при измерении дисперсного состава ингаляционных частиц.

ТССА получали в сварочной камере в процессе наплавки металла на вращающийся (1об/мин) диск (диаметр 180мм, толщина 12мм) из стали Ст3 полуавтоматом инверторного типа «Патон ПСИ-250Р DC MMA/MIG/MAG». Диапазон технологических параметров режима наплавки электродной проволокой Св08Г2С диаметром 0,8мм рекомендован ее производителем: постоянный ток обратной полярности (электродная проволока является положительным, а наплавляемый диск - отрицательным полюсами) от 50 до 125А и напряжение от 18 до 22 В. Среднее значения сварочного тока в опытах измерялись с помощью шунта, подключенного к вольтметру. Скорость подачи электродной проволоки в процессе наплавки определялась измерением длины проволоки, выходящей из контактного наконечника за заданное время и варьировалась от 4 см/с до 11 см/с. Во всех опытах поддерживали постоянными расстояние между контактным наконечником и наплавляемым диском (9 мм) и угол (90°), измеренный между диском и осью проволоки, а также расход CO<sub>2</sub> в процессе наплавки – 12 л/мин.

ТССА улавливали с помощью щелевого воздухозаборника, установленно-го в сварочной камере на расстоянии 20 см над дугой, с расходом удаляемого воздуха 1,7 м<sup>3</sup>/мин и направляли в вертикальную трубу для изокINETического



**Рис. 2.** ТЕМ изображения структур ингаляционных частиц [11]: первая мода - гомоагрегаты первичных частиц со средним диаметром  $3\pm 5$  нм (type 2); вторая мода - гетероагрегаты, содержащих первичные частицы со средним диаметром  $3\pm 5$  нм и  $10\pm 15$  нм (type 1)

отбора проб с расходом 1 л/мин [9]. Дисперсный состав ТССА измеряли с помощью лазерного аэрозольного спектрометра ЛАС-П с каналами (мкм): 0.15-0.2; 0.2-0.25; 0.25-0.3; 0.3-0.4; 0.4-0.5; 0.5-0.7; 0.7-1.0; 1.0-1.5; >1.5 [10]. Максимальная относительная погрешность при определении размера и счетной концентрации частиц не превышала 5% и 10%, соответственно, при их концентрации в пробе до  $2 \times 10^3 \text{ см}^{-3}$ . Типичные значения счетной концентрации частиц в пробах  $\sim 2 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$ . Поэтому, использовался аэрозольный разбавитель с коэффициентом разбавления 150 для расхода потока пробы 1 л/мин (рис.1). В разбавителе применялись аэрозольные фильтры, снаряженные тканью Петрянова (ФПП) с эффективностью улавливания не менее 99,97% для частиц диаметром 0,15-0,2мкм.

ТССА, образующийся при электродуговой сварке, имеет трех-модальное распределение ингаляционных частиц по размерам [9], где первые две моды представляют собой агломераты первичных частиц размером менее 1мкм (рис.2), а третья мода – частицы дезинтеграции электродной проволоки размером более  $1\pm 2$ мкм. Поэтому, данные измерений счетной концентрации частиц ТССА в первых семи каналах ЛАС-П обрабатывались в двух-модальном приближении.

Наилучшим приближением для измерений счетной концентрации частиц ТССА в диапазоне от 0,15 до 1 мкм является линейная комбинация двух логарифмических распределений (без учета вклада частиц дезинтеграции):

$$f(d, x, d_{m1}, \sigma_1, d_{m2}, \sigma_2) = x \cdot f_1(d, d_{m1}, \sigma_1) + (1 - x) \cdot f_2(d, d_{m2}, \sigma_2), \quad (1)$$

$$f_i(d, d_{mi}, \sigma_i) = \frac{1}{d \sqrt{2\pi \ln \sigma_i}} \exp \left[ -\frac{(\ln d - \ln d_{mi})^2}{2 \ln^2 \sigma_i} \right],$$

где  $d_m = \bar{d} \exp(-\ln^2 \sigma / 2)$  – медиана распределения;  $\bar{d}$  – средний размер частиц;  $\sigma$  – стандартное отклонение (дисперсия).

Для каждого  $j$  канала LAS-P записывается уравнение:

$$N_j = N_T \cdot \Delta d_j \cdot f(d_{cj}, x, d_{m1}, \sigma_1, d_{m2}, \sigma_2), \quad (2)$$

где  $N_j$  – число частиц, измеренных в  $j$  канале;  $N_T$  – неизвестное полное число частиц в объеме пробы, которое включает частицы с диаметром  $d < 0.15$  мкм;  $\Delta d_j$  – ширина канала;  $d_{cj}$  – среднее значение размера канала  $j$ . Решение системы уравнений (2) для первых семи каналов ЛАС-П позволяет определить параметры распределения частиц ТССА по размерам (1), вычислить средний диаметр  $\bar{d} = d_m \exp(\ln^2 \sigma / 2)$  и счетную концентрацию частиц каждой моды  $n_1 = x n_T$ ,  $n_2 = (1 - x) n_T$ , где  $n_T$  – общая счетная концентрация уловленных частиц.

**Дисперсный состав ТССА. Экспериментальные результаты.** Основными внешними технологическими параметрами режима сварки в защитном газе при заданных значениях диаметра электродной проволоки, расхода и состава защитного газа являются: скорость подачи электродной проволоки (в установленном режиме скорость подачи электродной проволоки в равной скорости ее плавления) –  $v$  см/с, напряжение источника питания дуги (напряжение дуги) –  $U$  В и сила сварочного тока –  $I$  А. На рис.3 представлены зависимости средних диаметров двух мод ингаляционных частиц ТССА от скорости подачи электродной проволоки.

Как видим, зависимости среднего размера первых двух мод частиц ТССА от  $v$  имеют немонотонный характер (рис.3). Аналогичный вид имеют зависимости средних размеров и счетных концентраций частиц мод ТССА от силы сварочного тока и напряжения дуги.

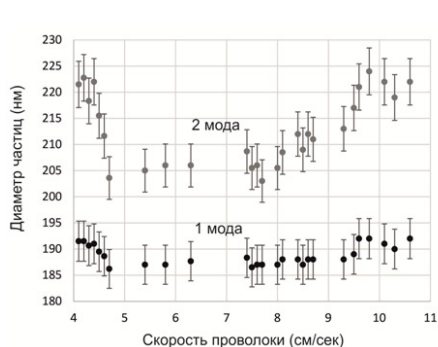
Поиск комбинации параметров режима сварки в защитном газе показал, что наблюдаемые тенденции изменения дисперсного состава ингаляционных частиц ТССА, описывает отношение энергии сварочной дуги к объему расходуемой электродной проволоки –  $E_V$  кДж/см<sup>3</sup>, (далее удельная энергия):

$$E_V = \frac{I \cdot U}{v \cdot S},$$

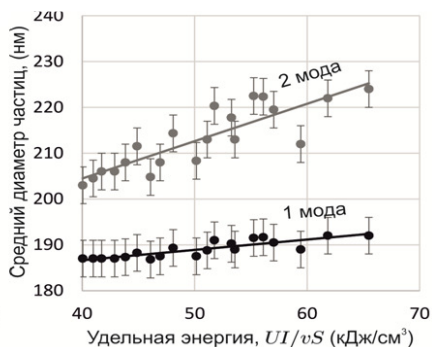
где,  $S$  – площадь сечения электродной проволоки (см<sup>2</sup>). На рис.4 и рис.5 представлены зависимости средних диаметров и счетных концентраций мод ингаляционных частиц ТССА от удельной энергии  $E_V$ .

Как следует из представленных результатов зависимости средних диаметров и счетных концентраций мод ингаляционных частиц ТССА от удельной энергии линейные. Увеличение  $E_V$  приводит к возрастанию доли энергии сварочной дуги расходуемой электродной проволокой, в результате интенсифицируется испарение и разбрызгивание расплавленного металла электродной проволоки (взрывное испарение) и возрастает интенсивность поступления паров материалов электродной проволоки в зону конденсации. Увеличение концентрации паров в зоне конденсации при прочих равных условиях способствует





**Рис. 3.** Зависимости средних диаметров мод ингаляционных частиц ТССА от скорости подачи проволоки  $v$

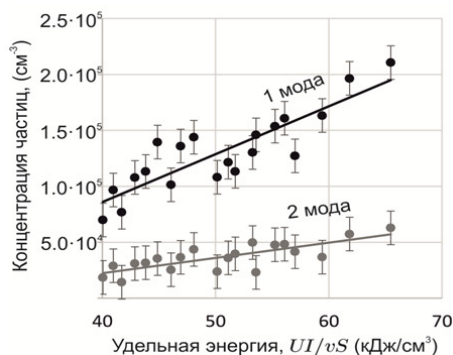


**Рис. 4.** Зависимости средних размеров мод ингаляционных частиц ТССА от удельной энергии

увеличению концентрации и размера первичных частиц, а также концентрации и размеров агломератов, образованных из этих частиц.

При этом, увеличение  $E_V$  примерно в 1,5 раза слабо влияет (рост в пределах 5%) на средний диаметр частиц первой моды (гомоагрегаты первичных частиц со средним диаметром  $3 \div 5$  нм) ингаляционных частиц ТССА (рис.4), в то же время их концентрация возрастает в  $1,5 \div 2$  раза (рис.5). Аналогично изменяется средний размер частиц второй моды (гетероагрегаты, содержащие первичные частицы со средним диаметром  $3 \div 5$  нм и  $10 \div 15$  нм) - в пределах  $5 \div 12\%$ , а их концентрация возрастает в  $1,2 \div 2,5$  раза.

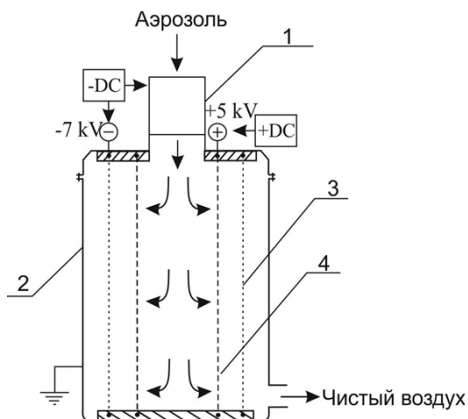
**Химический состав ТССА. Экспериментальные результаты.** Моделирование процесса образования ТССА при сварке электродной проволокой Св08Г2С в  $\text{CO}_2$  показало зависимость химического состава первичных частиц от их размера [12] - с увеличением диаметра частиц возрастает содержание железа, а марганца и кремния уменьшается (суммарное содержание Fe, Mn и Si в проволоке более 99,5%). Учитывая различие в типах структур ингаляционных частиц (рис.2) следует ожидать, что различия в химическом составе первичных частиц сохранятся и для мод ингаляционных частиц ТССА, несмотря на усреднение по множеству первичных частиц, которые образуют каждый агломерат. Для подтверждения этого предположения были проведены измерения химического состава и удельной поверхности фракций ТССА. Отбор проб фракций проводили методом электростатического осаждения предварительно заряженных ингаляционных частиц ТССА на проточные перфорированные и сетчатые электроды в наведённом электрическом поле [13]. ТССА получали в сварочной камере (рис.1) при  $E_V = 50 \text{ кДж/см}^3$  и улавливали с помощью щелевого воздухозаборника, установленного в сварочной камере на расстоянии 20 см над дугой, с расходом удаляемого воздуха  $1.7 \text{ м}^3/\text{мин}$ . Схема электрофильтра для фракционирования ТССА показана на рис.6.



**Рис. 5.** Зависимости счетной концентрации мод ингаляционных частиц ТССА от удельной энергии

Электрофильтр содержит: устройство униполярной зарядки [14], где частицы ТССА заряжаются в поле отрицательного коронного разряда (ток коронного разряда  $I_k = 600 \text{ мкА}$ , потенциал многоигольчатого коронирующего электрода  $U_1 = -7 \text{ кВ}$ ), и электростатический осадитель с двумя металлическими коаксиальными фильтрами, установленными на опорах из изоляционного материала. Первым по потоку запыленного воздуха расположен фильтр грубой очистки диаметром 14 см, изготовленный из перфорированной оцинкованной стали с круглыми отверстиями диаметром 1,2 мм и живым сечением 27%. Потенциал фильтра грубой очистки положительный ( $U_2 = +5 \text{ кВ}$ ). Фильтр тонкой очистки диаметром 20 см изготовлен из сетки нержавеющей стали с квадратными ячейками 0,063 мм, диаметром проволоки 0,04 мм и живым сечением 37%. Потенциал фильтра тонкой очистки отрицательный ( $U_1 = -7 \text{ кВ}$ ). По данным измерения массовой концентрации ТССА до и после электрофильтра его эффективность превышает 99%. Фракционирование ТССА в электростатическом осадителе осуществляется по электрической подвижности ингаляционных частиц, которая зависит от их размера [14]. Осадок ТССА на внутренней (лицевой по потоку) поверхности фильтра грубой очистки преимущественно содержит частицы второй моды ТССА (фракция 1). Частицы первой моды ТССА осаждаются на внешнюю поверхность фильтра грубой очистки в результате действия электростатических сил в направлении противоположном потоку запыленного воздуха, и формирования завихрений потока (рециркуляционных зон) при его течении через отверстия фильтра с малым живым сечением (фракция 2), а также внутреннюю поверхность фильтра тонкой очистки (фракция 3). Для образцов фракций ТССА проводились измерения удельной поверхности методом БЭТ (Quantachrome Autosorb-6B) и элементного состава (Атомно-абсорбционный спектрофотометр Сатурн-3П1). Результаты измерений представлены в табл. 1.

Как следует из представленных в табл. 1 данных, частицы первой моды ТССА (72% масс.) являются наиболее токсичной группой ингаляционных



**Рис. 6.** Схема электрофильтра для фракционирования ТССА: 1 – устройство униполярной зарядки; 2 – электростатический осадитель; 3 – сетчатый фильтр тонкой очистки; 4 – перфорированный фильтр грубой очистки

**Таблица 1.** Удельная поверхность и элементный состав фракций ТССА

Параметр	Фракция 1	Фракция 2	Фракция 3
Массовая доля в ТССА (%)	28	39	33
Удельная поверхность (м <sup>2</sup> /г)	16,8	30,8	28,5
Содержание Fe (%)	60,4	53,1	54,9
Содержание Mn (%)	7,3	8,8	8,7
Содержание Si (%)	2,8	6,2	5,1
Содержание O и примесей (%)	29,5	31,9	31,3

частиц из-за их большой удельной поверхности и повышенного содержания марганца. Поэтому, для санитарно-гигиенического оценивания условий труда сварщиков важно извлечь эту группу частиц и анализировать ее отдельно. Корреляция между элементным составом мод ингаляционных частиц ТССА и их удельной поверхностью отражает зависимость химического состава первичных частиц от их размера [12] и различия в типах структур агломератов.

**Заключение.** Исследовано влияние технологических параметров режима сварки на дисперсный состав ингаляционных частиц, образующихся при электродуговой сварке углеродистых и низколегированных сталей в защитном газе. Показано, что средний диаметр ингаляционных частиц ТССА и их счетная концентрация линейно зависят от отношения энергии сварочной дуги к объему расходуемой электродной проволоки ( $E_V = I \cdot U / v \cdot S$ ). Увеличение  $E_V$  приводит к незначительному ( $\leq 12\%$ ) росту размеров ингаляционных частиц и существенному (1,2÷2,5 раза) увеличению их концентрации в зоне дыхания

сварщика. Установлена корреляция между элементным составом мод ингаляционных частиц ТССА и их удельной поверхностью.

### Литература:

1. Antonini J.M. Health effect of welding // Critical Reviews of Toxicology. – 2003. – V. 33(1). – P. 61-103.
2. Donaldson K., Brown D., Clouter A. The pulmonary toxicology of ultrafine particles // J Aerosol Med. – 2002. – V. 15. – P. 213–220.
3. Oprya M., Kiro S., Worobiec A., Horemans B., Darchuk L., Novakovic V., Ennan A., Van Grieken R. Size distribution and chemical properties of welding fumes of inhalable particles // Journal of Aerosol Science. – 2012. – V. 45. – P. 50-57.
4. Pokhodnya I.K., Yavdoshchin I.R., Gubinya, I.P. Welding fume—Factors of influence, physical properties // The Paton Welding Journal. - 2011. – V. 6. – P. 33–35.
5. Worobiec A., Stefaniak E.A., Kiro S., Oprya M., Bekshaev A., Spolnik Z., Potgieter-Vermaak S.S., Ennan A., Van Grieken R. Comprehensive microanalytical study of welding aerosols with X-ray and Raman based methods // X-Ray Spectrometry. - 2007. – V. 36. – P. 328–335.
6. Oberdorster G. Significance of particle parameters in the evaluation of exposure-dose-response relationships of inhaled particles // Inhalation Toxicology. – 1996. – V. 8. – P. 73–89.
7. Ojima J. Performance of a fume-exhaust gun system in CO<sub>2</sub> arc welding // Journal of Occupation Health. – 2006. – V. 48. – P. 207-209.
8. Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Oprya M.V., Ennan A.A Effects of shielding gas temperature and flow rate on the welding fume particle size distribution // Journal of Aerosol Science. – 2017. – V. 114. – P. 55-61.
9. Ennan A.A., Kiro S.A., Oprya M.V. and Vishnyakov V.I. Particle size distribution of welding fume and its dependency on conditions of shielded metal arc welding // Journal of Aerosol Science. – 2013. – V. 64. – P. 103-110.
10. Лазерный аэрозольный спектрометр (ЛАС-II). Научно-исследовательский физико-химический институт имени Л. Я. Карпова. – 2010. – модель 9814.290.000.
11. Miettinen M., Torvela T., Leskinen J.T.T. Physicochemical characterization of aerosol generated in gas tungsten arc welding of stainless steel // Annals of Occupational Hygiene. – 2016. – V. 60. – P. 960-968
12. Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Oprya M.V., Chursina O.D., Ennan A.A. Numerical and experimental study of the fume chemical composition in gas metal arc welding // Aerosol Science and Engineering. – 2018. – P. 1-9. doi.org/10.1007/s41810-018-0028-2
13. Эннан А.А., Опря М.В., Киро С.А., Вишняков В.И. О новых возможностях электростатического улавливания твердой составляющей сварочного аэрозоля // Физика аэродисперсных систем. – 2017. – №54. – С. 122-128.
14. Vishnyakov V.I., Kiro S.A., Oprya M.V., Ennan A.A. Charge distribution of welding fume particles after charging by the corona ionizer // Journal of Aerosol Science. – 2016. – V. 94. – P. 9-21.

***Кіро С. А., Опря М. В., Еннан А. А.-А.***

**Вплив параметрів режиму електродугового зварювання у захисному газі на дисперсний і хімічний склад частинок зварювального аерозолію**

**АНОТАЦІЯ**

*Розглянуто вплив параметрів режиму зварювання на дисперсний склад інгаляційних частинок, що утворюються при зварюванні вуглецевих і низьколегованих сталей у захисному газі (CO<sub>2</sub>). Показані залежності бімодального розподілу частинок за розмірами від відношення енергії зварювальної дуги до об'єму витраченої електродної проволочки у діапазоні від 40 до 70 кДж/см<sup>3</sup>. Представлені результати вимірювань елементного складу і питомої поверхні мод інгаляційних частинок зварювального аерозолію.*

***Kiro S.A., Oprya M.V., Ennan A. A.-A.***

***Influence of the gas metal arc welding regime parameters on the disperse and chemical composition of the welding fume particles***

**SUMMARY**

*The influence of the gas (CO<sub>2</sub>) metal arc welding regime parameters on the disperse composition of the welding fume inhalable particles is studied. Dependences of the bimodal particle size distribution on the ratio of the welding arc energy to the volume of the consumed electrode wire in the range from 40 to 70 kJ/cm<sup>3</sup> are demonstrated. The results of measurements of elemental composition and specific surface of the welding fume modes are presented.*

---

## ПРИЛАДИ І МЕТОДИ ВИМІРЮВАННЯ

---

УДК 632.6

**Контуш С.М., Ахмеров А.Ю., Мандель В.Е., Чурашов В.П.**

*Одесский национальный университет имени И.И.Мечникова*

*E-mail: skontush@odessaglobe.com*

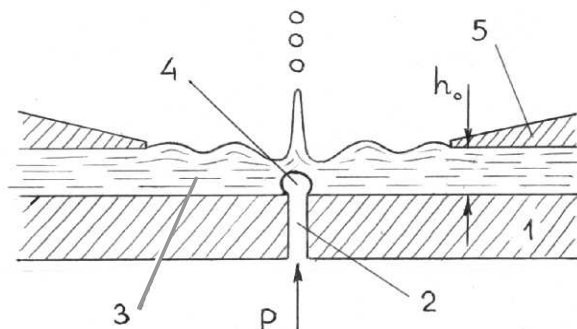
### **Пневматический генератор струи монодисперсных капель**

*Анализируется взаимное согласования времени роста и разрушения пузырька воздуха и периода колебаний круговых капиллярных волн на поверхности тонкого слоя жидкости. Найдены две оптимальные конструкции генератора струи монодисперсных капель с разрушением пузырьков в тонком слое жидкости и показаны варианты его функционирования*

Получение монодисперсных капель разных жидкостей является важным процессом для современных технологий [1-6]. Известно, что при использовании в технике наиболее распространенных пневматического и механического методов распыления жидкостей образуется, как правило, поток полидисперсных капель, что нежелательно для многих научных и технологических приложений [1]. Лишь в одном из известных механических устройств монодисперсные капли образуются при стекании пленки жидкости с края вращающегося диска [2]. Ультразвуковой и электростатический способы распыления жидкостей также не дают капли строго одинакового размера [3,4].

В основе образования струй монодисперсных капель лежит явление капиллярности жидкостей, согласованное с влиянием некоторых внешних сил. Возникновение капиллярных волн на поверхности жидкостей хорошо известно. Так, их развитие на тонких струях жидкостей приводит к распаду струй на капли и к управляемому процессу образования монодисперсных капель [1]. Такой подход известен со времени исследований Дж. Рэлея, проведенных им в конце 19 века.

Большое распространение монодисперсное генерирование капель получило при маркировании изделий с помощью каплеструйных принтеров [2], в которых тонкая струя капель красящей жидкости, управляемая электрическим полем и компьютером, формирует любые символы на движущихся поверхностях. Широко распространенные струйные принтеры также используют потоки монодисперсных капель, образующихся одновременно из нескольких сопел очень малого диаметра под действием колебаний в жидкости. На плоских поверхностях жидкости капиллярные волны от разных источников взаимодействуют друг с другом с образованием интерференционных картин, подобных оптическим. Подобно этому, взаимодействуют друг с другом капиллярные волны, отраженные от препятствий и при правильной организации взаимодействия по-



**Рис. 1.** Схема работы генератора струи монодисперсных капель  
 1 – плоская пластина, 2 – сопло, 3 – пленка жидкости,  
 4 – пузырек воздуха, 5 – кольцо

тока газа (воздуха) с распыляемой жидкостью становится возможным монодисперсное пневматическое распыление.

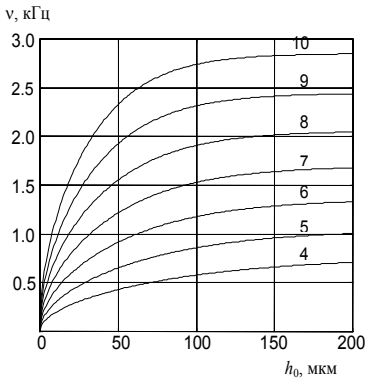
Рассмотрим случай образования капель при пропускании газа через тонкий слой жидкости, окруженной кольцевой стенкой или кольцом (рис. 1). Слой жидкости находится на хорошо смачиваемой подложке, а газ подается через малое сопло в центре системы с таким расходом, чтобы в жидкости возникали пузырьки газа, следующие один за другим после разрушения предыдущего.

На рис. 1 показано, что при разрушении пузырька возникают два явления – кумулятивный всплеск от разрушающегося пузырька (его “схлопывание”) и радиальные поверхностные (капиллярные) волны, идущие от центра системы к окружающей слой жидкости круговой стенке.

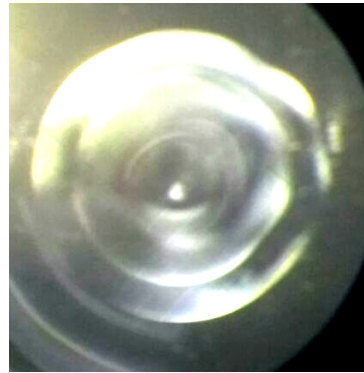
В работе [3] показано, что в следующей фазе процесса от пика всплеска отделяется капля, а возникающая на поверхности жидкости круговая капиллярная волна отражается от стенки и возвращается центру системы, к отверстию, через которое подается в жидкость воздух. К этому моменту над отверстием должен “вырасти” новый пузырек воздуха. Под воздействием сходящейся к центру волны его верхняя часть (“купол”) разрушается, и выброс нового всплеска и возникновение круговой волны повторяются.

Основным условием многократного повторения описанного процесса является точное совпадение фаз роста пузырька до критического размера, равного толщине слоя жидкости, и возвращения к центру круговой волны. Основную роль в описанном явлении образования отдельных капель играют капиллярные эффекты, поэтому все элементы системы должны быть достаточно малых размеров, чтобы гравитационные и аэродинамические эффекты не влияли на образование капель.

Повторяющиеся акты возникновения и разрушения пузырьков представляют собою периодическое воздействие, которое возбуждает колебания резо-



**Рис. 2.** Зависимость собственных частот от толщины пленки; цифры возле кривых означают номера мод, к которым они относятся



**Рис. 3.** Фотография стоячих волн на поверхности водяной пленки внутри ограничивающего кольца

натора, состоящего из пленки жидкости, окруженной кольцом. В общем случае может возникать большое число мод, что приводит к очевидной нерегулярности колебаний, однако, если временные характеристики роста и распада пузырьков должным образом согласованы с периодом какой-либо моды, то только одна эта мода и возбуждается.

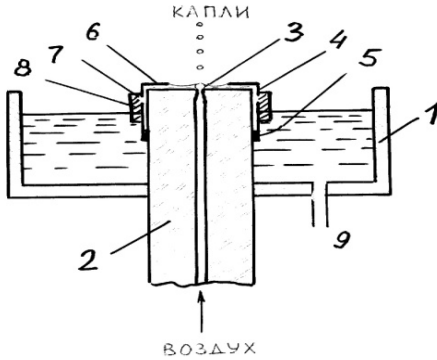
С другой стороны, периодическое движение капиллярных волн на поверхности пленки обеспечивает своеобразную самоподдержку и самоподстройку моды, создавая в определенные моменты времени условия, которые принуждают пузырьки схлопываться согласованно с капиллярными колебаниями (например, путем вариаций толщины пленки или давления в отверстии). Иными словами, в такой системе реализуется режим **автоколебаний**, при котором все параметры движения периодически воспроизводятся с большой точностью; в итоге образующиеся капли приобретают строго одинаковые размеры и скорости.

Основное условие достижения такого режима состоит во взаимном согласовании времени роста пузырька и периода колебаний круговых капиллярных волн на поверхности жидкости. В данной системе может возбуждаться только дискретный набор собственных колебательных мод с четко определенными частотами колебаний [7], которые определяются по вытекающей из теории капиллярных волн формуле:

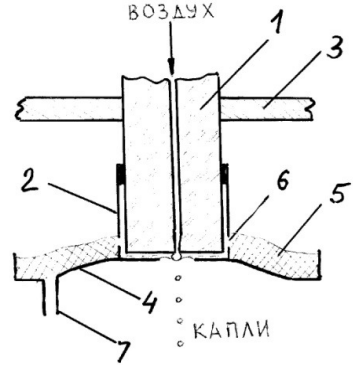
$$v_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\left(\frac{s_n}{R}\right)^3 \frac{T}{\rho} \tanh\left(\frac{s_n h_0}{R}\right)}, \quad (1)$$

где  $R$  – радиус кольца,  $T$  – поверхностное натяжение пленки,  $h_0$  – ее номинальная толщина,  $\rho$  – плотность жидкости, а  $s_n$  есть  $n$ -й корень функции Бесселя





**Рис. 4а.** Схема генератора капель с выбросом капель вверх



**Рис. 4б.** Схема генератора капель с выбросом капель вниз

ся  $J_1(x)$ . Эти частоты существенно зависят от конструктивных параметров прибора; в частности, зависимость от толщины пленки, что иллюстрируется рис. 2.

Типичная картина колебаний пленки видна на микрофотографии (рис.3)

Создание реальной конструкции генератора монодисперсных капель (ГМК) данного типа связано с преодолением некоторых технических проблем, связанных с наличием нескольких параметров, очень малые изменения которых значительно влияют на его устойчивую работу. В первую очередь, конструкция ГМК требует изготовления сопла малого диаметра в хорошо смачиваемой плоской поверхности торца капиллярной трубки. Кроме этого, необходимо обеспечить устойчивость и заданную толщину слоя жидкости над соплом, а также поддержание постоянства малого давления подачи воздуха. В связи с этим были испытаны несколько разных конструкций ГМК, и найдены два его оптимальных варианта со следующими параметрами:

- оптимальный диаметр сопла лежит в пределах 20 – 30 мкм;
- диаметр кольца резонатора должен быть равен 2 мм;
- зазор между плоскостью с соплом и кольцом резонатора должен быть равен 0,2 – 0,3 мм;
- для лучшего смачивания поверхность торца капиллярной трубки с соплом делается слегка шероховатой (матруется) абразивным методом.

Расположение сопла для подачи воздуха в центре подверженной гравитации жидкой пленки не дает, по-видимому, возможности конструировать такой ГМК с выбросом капель в каком-либо боковом направлении. Но с учетом того факта, что работа генератора основана на явлении капиллярности, возможна конструкция ГМК с выбросом капель строго вниз. На этом основании были сконструированы два ГМК: в одном капли выбрасывались строго вверх, в другом - строго вниз (рис.4, а,б).

Основной частью обоих генераторов является толстостенный стеклянный капилляр 2, установленный в центре небольшого сосуда 1. В верхней части капилляра внутренний канал сужается, образуя сопло диаметром около 20-30 мкм. Торец капилляра имеет матовую поверхность. Важной частью генератора является насадка 4 на конец капилляра с соплом. Она состоит (рис.4а) из металлической муфты 5, плотно одеваемой на капилляр, верхняя часть которой (длиной около 6-7 мм) имеет внутренний диаметр примерно на 0,5 мм больший, чем наружный диаметр капилляра. Эта часть заканчивается пластиной 6 с отверстием, диаметр которого равен 2 мм. Она играет роль кольца для отражения круговых волн. Вблизи пластины 6 металлическая муфта 5 имеет прорези 7 для подачи жидкости в зазор между пластиной 6 и торцом капилляра 2. Прорези окружены кольцом 8 из подходящего гигроскопического материала. Муфта насаживается на капилляр таким образом, чтобы торец капилляра с соплом не доходил до пластины на 0,2 – 0,3 мм.

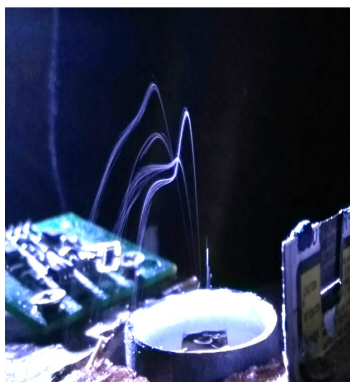
С использованием этих двух основных частей (толстостенный капилляр и насадка) генератор может быть собран для двух основных случаев – генерации струи капель, движущихся вверх, и, наоборот, для струи капель, движущихся вниз. В первом случае (рис.4а) капилляр 2 вместе с насадкой 4 устанавливается в корпусе 1 так, чтобы пластина 6 была сверху. Снизу этого сосуда имеется патрубок 9 для подвода к генератору жидкости.

Во втором случае (рис.4б) капилляр 1 вместе с насадкой 2 устанавливается с помощью держателя 3 так, чтобы торец капилляра был направлен вниз. Для подачи жидкости для распыления используется скрепленный с насадкой 2 небольшой плоский сосуд 4 с гигроскопическим материалом 5, который имеет в дне отверстие, край которого играет роль кольца для отражения капиллярных волн. Сосуд 4 имеет вид прямоугольника размером 15х30 мм с бортом вокруг высотой 0,5 мм, на которой уложен гигроскопический материал. Край отверстия в гигроскопическом материале плотно прилегает к прорезям 6 на насадке. Снизу к пластине укреплен патрубок 7 для подачи жидкости.

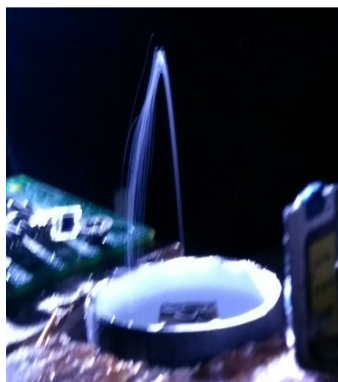
Для изучения работы ГМК генератор 1-го типа был установлен на жестком основании, на котором также были укреплены для проведения измерений осветитель, малооборотный двигатель со штангой с предметным стеклом для улавливания капель и бинокулярный микроскоп для фотографирования капиллярных волн на поверхности жидкости и капель на предметном стекле. Кроме того, над генератором был установлен лазерный измеритель размеров капель, работа которого основана на регистрации тени от капель, пересекающих плоский поток лазерного излучения [8]. Для подачи воздуха в генератор использовался микрокомпрессор, буферный сосуд с манометром и микрокран. Уровень жидкости в сосуде с генератором регулировался простой U-образной системой.

Важным условием длительной эксплуатации генератора является тщательная очистка воды и воздуха, используемых в процессе измерений. Это связано с малым диаметром сопла генератора, в котором при длительной работе осаждаются частицы, как из воздуха, так и из жидкости.

Разнообразные сведения о работе описанного генератора струи монодисперсных капель получены в результате комплексного изучения его параметров.



**Рис. 5а.** Режим генерации нескольких струй капель



**Рис. 5б.** Режим генерации одиночной струи капель

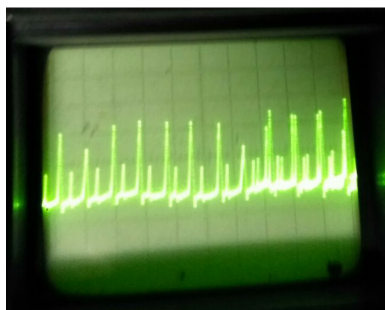
В качестве примера ниже приведены результаты измерений параметров одного из таких генераторов.

Для приведения генератора монодисперсных капель в действие, прежде всего, необходимо наполнить жидкостью (например, дистиллированной водой) сосуд 2 до такого уровня, чтобы на поверхности стеклянного капилляра образовалась пленка. Затем следует подать сжатый воздух в капилляр под таким давлением, чтобы возникло разбрызгивание жидкости над соплом из тонкого слоя жидкости в виде хаотически летящих капель. Затем необходимо медленно снижать давление до прекращения процесса разбрызгивания жидкости. Опять несколько раз повышая и снижая давление, нужно найти такое его значение, что даже очень небольшое повышение которого приводит к хаотическому разбрызгиванию.

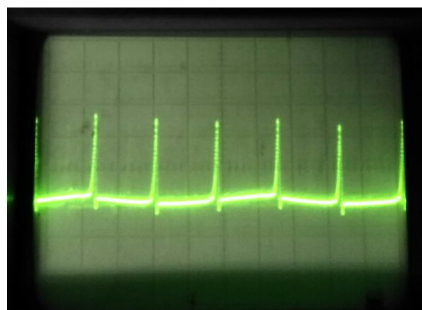
Далее необходимо медленно уменьшать количество жидкости, подаваемое в зону образования капель посредством понижения уровня жидкости в сосуде 2. Очень медленное изменение этого параметра при стабильном давлении воздуха приведет к “сворачиванию” хаотического разбрызгивания и образованию 2-3 тонких струй капель. Последующее малое снижение подачи жидкости выведет генератор на рабочий режим – генерирование тонкой струи монодисперсных капель.

Ниже приведены фотографии потоков капель, полученные при разных режимах работы генератора. Как видно из них, при настройке генератора вначале возникают несколько струй капель (рис.5а), а при возникновении резонансного режима образуется одиночная струя монодисперсных капель (рис.5б).

Соответственно, капли не всегда являются монодисперсными - монодисперсный режим реализуется лишь при резонансном режиме работы устройства. Если капли осаждались на стеклянную пластину, покрытую тонким слоем масла и двигающуюся со скоростью 10 см/с, то можно определить как частоту их образования, так и их линейные размеры с помощью микроскопа.



**Рис. 6а.** Оциллограмма образования двух струй капель



**Рис. 6б.** Оциллограмма образования одиночной струи монодисперсных капель

Эти явления иллюстрируются данными регистрации капель лазерным теневым счетчиком. Так, на Рис.6 показаны оциллограммы двух разных случаев – образования двух разной дисперсности струй (Рис.6а) и одиночной струи монодисперсных капель (Рис.6б).

В соответствии с проведенным анализом, системы из таких стоячих волн должны не постепенно, а скачками переходить одна в другую при изменении одной из переменных. В качестве такой переменной было использовано давление воздуха. По мере повышения давления система волн из 2-х или 3-х колец отдельными шагами переходит из такой системы в более сложную. При этом, естественно, увеличивается частота образования капель и их размер.

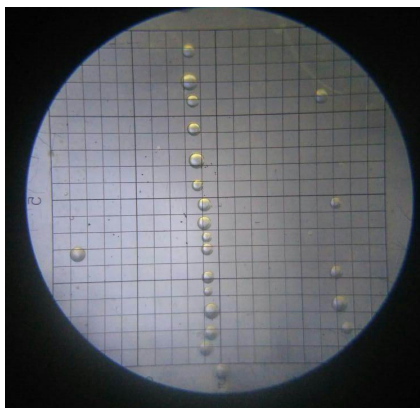
При проведении предыдущих отдельных измерений характеристик ГМК получены также сведения о двух явлениях, сопровождающих его работу.

Во-первых, обнаружено, что при периодических колебаниях жидкой пленки при устойчивой работе ГМК возникают звуковые волны в окружающей среде той же частоты, что и при генерировании капель [9]. Эти звуковые волны были зарегистрированы с помощью чувствительного микрофона и записаны в компьютере.

Во-вторых, как и в других процессах дробления воды, образующиеся в ГМК капли воды несут на себе электрические заряды отрицательного знака.

Значения зарядов невелики, но все капли заряжены строго одинаково [10, 11]. Естественная зарядка капель воды обусловлена наличием на поверхности воды (и некоторых водных растворов) двойных электрических слоев, разрушение которых при образовании капель приводит к разделению зарядов. Положительные заряды при этом остаются на элементах ГМК.

В принципе, управление параметрами генерации осуществляется также путем изменения номинальной толщины пленки  $h_0$  и радиуса резонансного кольца  $R$ . Несмотря на трудности обеспечения стабильной работы в широком диапазоне перестраиваемых параметров, эксперименты с различными образцами позволили получить генерацию струй капель при следующих параметрах:  $p_a = (1.1 - 1.5) \cdot 10^5$  Па,  $h_0 = 40 - 150$  мкм, диаметр сопла - 10 - 20 мкм. В этих услови-



**Рис. 7.** Микрофотография монодисперсных капель, осажденных на подложку (диаметр капель 80 мкм, частота генерирования 380 Гц)

ях диаметр капель изменялся в пределах от 6 до 50 мкм, их скорости лежали в интервале между 0.5 и 3.0 м/с, а частоты  $\nu = 0.6 - 10$  кГц. Степень монодисперсности капель, по визуальным оценкам с помощью микроскопа, достигает нескольких процентов.

Таким образом, в результате проведенной работы найдены две оптимальные конструкции генератора струи монодисперсных капель с разрушением пузырьков в тонком слое жидкости и показаны возможные варианты его функционирования.

#### Литература:

1. Дитякин Ю. Ф., Клячко Л. А. и др. Распыливание жидкостей. – М.: Машиностроение, 1977. – 207 с.
2. Дунский В.Ф., Никитин Н.В., Соколов М.С. Монодисперсные аэрозоли. – М.: Изд-во “Наука”, 1975. – 192 с.
3. Хмелев В.Н. Ультразвуковое распыливание жидкостей, Изд. Алт. гос. техн. ун-та, Бийск, 2010. – 271 с.
4. Верещагин И.П. и др. Электрогазодинамика дисперсных систем. - М.: Энергия, 1974. – 480 с.
5. Монодиспергирование веществ: принципы и применение / Под ред. В.А.Григорьева. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 331 с.
6. Безруков В.И. Основы электрокаплеструйных технологий. Изд-во “Судостроение”, 2001. – 256 с.
7. Bekshaev A.Ya., Kontush S.M., Rybak S.S., Schweiger G., Esen C. Resonance penetration of gas bubbles through a thin liquid layer: a capillary resonator and its use for the generation of droplets // Journal of Aerosol Science. – 2003. – Vol. 34. – P. 469-484.

8. Черненко А.С., Контуш С.М., Зинченко А.С., Калинин В.В., Калугин В.В. Определение гранулометрического состава порошков пылеугольного топлива автоматизированной системой определения дисперсности. // Приборы и методы измерений – Минск, БНТУ, 2015, №1 (10). – С.87-94.
9. Kontush S.M., Rybak S.S., Leonova L.Yu. The pneumatic capillary wave whistle. Proceeding of the XIII Session of the Russian Acoustical Society, Moscow, August 25-29, 2003. – pp. 411-414.
10. Krasnitski V.I., Apasov A.M., Kontush S.M. The inductive charging of water droplets under partial coalescence. // Letters in Journal of Technical Physics. – 1990. – V.16. – №.18.
11. Lopatenko S.V., Kontush S.M. Some characteristics of drops charging during of breaking up of water streams // Physics of Aerocolloidal Systems. – 1980. – №.21.

**Контуш С.М., Ахмеров О.Ю., Мандель В.Ю., Чурашов В.П.**  
Пневматичний генератор струменя монодисперсних крапель

#### АНОТАЦІЯ

*Наведена теорія виникнення струменя монодисперсних крапель при узгодженні часу зростання і руйнування пухирців повітря та періоду кругових капілярних коливань на поверхні тонкого шару рідини. Розроблено дві оптимальні конструкції відповідного генератора струменя монодисперсних крапель і показані можливі варіанти його функціонування.*

**Kontush S.M., Akhmerov O.Yu., Mandel V.Yu., Churashov V.P.**  
**Pneumatic jet generator of monodisperse drops**

#### SUMMARY

*The emergence's theory of a jet of monodisperse droplets is given when the growth and destruction time of air bubbles and the oscillations period of circular capillary on the thin liquid layer's surface is coordinated. Two optimal designs of the corresponding generator of a monodisperse droplets jet are developed and possible variants of its functioning are shown.*

## АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

<b>А</b>		<b>О</b>	
Алтоїз Б.А.	37	Опря М. В.	126,149
Ахмеров О.Ю.	158	Орловская С.Г.	53
<b>Б</b>		<b>П</b>	
Бритавський Е. В.	71	Полетаєв М. І.	59,80
Буланин Ф. К.	59,80	Поповський А.Ю.	37
Бутенко А.Ф.	37		
Буяджи В. В.	95,104	<b>Р</b>	
<b>В</b>		Рокицька Г. В	8
Вишняков В. І.	112,126	Рокицький М. О.	8
		Романова А. В.	104
<b>Г</b>		<b>С</b>	
Галкін М. Б.	30	Свинаренко А. А.	95,104
Глушков А. В.	95,104	Сікорський М. В.	71
<b>Д</b>		Сидоров О. Є.	59,80
Джоу Хуюї	30	Скапцов А. С.	139
Драган Г. С.	30,121	Софронков О. Н.	95,104
Дубровская Ю. В.	95	Старіков М. А.	59
<b>Ж</b>		Стасюк І. М.	8
Жарюк В. Н.	14	Стукалов С. А.	71
<b>І</b>		<b>Ф</b>	
Ігнатенко А. В.	104	Філіпова Т. О.	30
<b>К</b>		<b>Х</b>	
Кабаненко Р. В.	112	Хецелиус О. Ю.	95
Калінчак В. В.	45,71	Хлебникова М. Е.	59
Кіро С. А.	80,112,149	<b>Ч</b>	
Колесніков К.	121	Черненко О. С.	45,71
Контуш С. М.	139,158	Чурашов В.П.	158
Корчагіна М. М.	45	<b>Ш</b>	
Кугаров В. В.	30,121	Шевчук В. Г.	59,80
<b>Л</b>		Шингарєв Г.Л.	139
Лисянская М.В.	54	Шуг А. М.	8
		Шуг М. І.	8
<b>М</b>		<b>Щ</b>	
Мандель В.Е.	158	Щекатолина С. А.	14
		<b>Э</b>	
		Еннан А. А.-А.	126,149

## NAME INDEX

<b>A</b>		<b>L</b>	
Akhmerov O.Yu.	158	Liseanskaia M. V.	54
Altoiz B.A.	37		
<b>B</b>		<b>M</b>	
Brytavsky E.V.	71	Mandel V.Yu.	158
Bulanin Ph.	59,80		
Butenko A.F.	37	<b>O</b>	
Buyadzhi V. V.	95,104	Oprya M.V.	126,149
		Orlovskaya S. G.	54
<b>C</b>		<b>P</b>	
Chernenko A.S.	45,71	Poletaev N.I.	59,80
Churashov V.P.	158	Popovskii A.Yu.	37
<b>D</b>		<b>R</b>	
Dragan G.S.	30,121	Rokytska H.V.	8
Dubrovskaia Yu.V.	95	Rokytskyi M.O.	8
		Romanova A. V.	104
<b>E</b>		<b>S</b>	
Ennan A. A.-A.	126,149	Sidorov A.E.	59,80
		Shevchuk V.G.	59,80
<b>F</b>		Shut A.M.	8
Filipova T.O.	30	Shut M.I.	8
		Shynharov G.L.	149
<b>G</b>		Sikorsky M.V.	71
Galkin N.B.	30	Skaptsov A.S.	139
Garyuk V. N.	14	Sofronkov A.N.	95,104
Glushkov A. V.	95,104	Starikov M.A.	59
		Stasiuk I.M.	8
<b>I</b>		Stukalov S.A.	71
Ignatenko A. V.	104	Svinarenko A.A.	95
<b>K</b>		<b>T</b>	
Kabanenko R.V.	112	Tchekatolina S. A.	14
Kalinchak V.V.	45,71		
Khetselius O.Yu.	95	<b>V</b>	
Khlebnikova M.E.	59	Vishnyakov V. I.	112,126
Kiro S.A.	80,112,149		
Kolesnikov K.	121	<b>Z</b>	
Kontush S.M.	139,158	Zhou Huiyu	30
Korchagina M.N.	45		
Kutarov V.V.	30,121		



## ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРІВ СТАТЕЙ

1. У науковому збірнику публікуються статті з оригінальними результатами наукових досліджень з тематики:

- випаровування, конденсація, коагуляція і електрична зарядка аерозолів, механізми їх утворення і переносу;
- горіння аеродисперсних систем;
- тепломасообмін і газодинамічні явища в дисперсних системах при фазових і хімічних перетвореннях;
- низькотемпературна плазма з конденсованою дисперсною фазою.

2. Статті з результатами досліджень, виконаними в організаціях, подаються з дозволем цієї організації на публікацію і супровідним листом. Рукопис підписується авторами (автором). На окремому листі необхідно вказати прізвище, ім'я, по батькові, місце роботи, посаду, контактні телефони і адреси (електронний і поштовий).

3. Текст статей представляється в двох екземплярах на українській, російській або англійській мові з двома анотаціями на двох (з трьох вказаних) мовах, відмінних від мови оригіналу статті і електронним файлом на електронну адресу редакції. Файл створюється в Word і повинен містити текст статті, анотацію і рисунки. Назва файлу утворюється від прізвища першого автора.

4. Статті проходять наукове рецензування. У разі негативної рецензії стаття присилається на доопрацювання або відхиляється.

### Оформлення статті

Матеріал статті повинен бути викладений в такій послідовності:

- 1) номер УДК;
- 2) ініціали і прізвища авторів;
- 3) назва організації (ї), що представляє (ють) статтю (якщо організації більше, ніж одна, після прізвища кожного автора ставиться знак виноски (1, 2 і т. д.), а нижче указуються всі організації, назви міст, електронна пошта одного з авторів;
- 4) назва статті;
- 5) анотація;
- 6) текст статті;
- 7) література;
- 8) анотації на 2-х згаданих вище мовах, відмінних від мови оригіналу статті, з прізвищами і ініціалами авторів і назвою статті.

Об'єм статті, включаючи рисунки, літературу, анотації, не повинен перевищувати 10 сторінок тексту, надрукованого на комп'ютері через 1 інтервал (з розміром букв 14 pt). Поля: ліве – 20 мм, праве 20 мм, вверху 20 мм, внизу 20 мм. Назва статті, прізвища авторів і назва організації друкуються буквами, розміром 14 pt з міжрядковою відстанню між УДК, назвою статті і прізвищами авторів 1.5 інтервалу.

**Формули:** Набираються шрифтом розміру 14 пунктів. Розміри формул однакові по всьому тексту. Слід уникати індексів у індексів і ступенів у ступенів. Застосовується скрізна нумерація формул: (1), (2) і так далі. Грецькі букви та позначення хімічних формул завжди прямі. Вектори і матриці набирати напівжирним прямим шрифтом (стрілка над вектором не використовується). Індеси (латинські букви) у формулах набираються курсивом, за винятком скорочень слів типу min, max, eff, а також нуля, які набираються прямим шрифтом. Прямим шрифтом набираються також функції, наприклад  $\sin 2x$ ,  $\cos \omega t$  і так далі.

**Таблиці.** Таблиці нумерують тільки в тому випадку, якщо їх більше однієї. Відступ до таблиці і після неї – 2 інтервали. При необхідності таблиці можуть мати заголовки і примітку.

**Ілюстрації.** Ілюстрації виконуються по ходу викладення тексту статті по мірі їх згадки в тексті в rscx форматі або іншому поширеному форматі. Під рисунком друкується відповідний підпис. Написи, що ускладнюють сприйняття рисунку, замінювати цифровими або буквеними позначеннями і переносити в текст статті або в підпис під рисунком. Всі позначення на рисунку повинні відповідати позначенням в тексті. Нумерацію кривих на рисунку вести зверху вниз, зліва направо. Розмір рисунка повинен бути не менше 50x50 мм і не більше 100x100 мм.

**Література.** Після тексту статті через 2 інтервали друкується список літературних джерел, використовуваних в статті, на мові оригіналу за зразком:

**Книги:**

1. *Бабий В.И., Куваев Ю.Ф.* Горение угольной пыли и расчет пылеугольного факела. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 206с.
2. Основы практической теории горения: учебное пособие для вузов // *В.В. Померанцев, К.М. Арефьев, Д.Б. Ахметов и др.* // под ред. *Померанцева*. – Л.: Энергоатомиздат, 1986. – 312с.

**Статті:**

- a. *Асланов С.К., Копейка П.И.* Об особенностях моделей детонационного спина в различных горючих средах. // *Физика аэродисперсных систем*. – 1971. – Вып. 5. – С.92-100.
- b. *Флорко А.В., Золотко А.Н., Каминская Н.В., Шевчук В.Г.* Спектральные исследования горения частицы магния // *Физика горения и взрыва*. – 1982. – Т.18, №1. – С.17-22.
- c. *Калинчук В.В.* Тепломассообмен и кинетика химических реакций углеродной частицы с газами // *Вісник Одеськ. держ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки*. – 1999. – Т.4, вип.4. – С.12-16.
- d. *Zatovsky A.V., Zvelindovsky A.V.* Hydrodynamic fluctuations of a liquid with anisotropic molecules // *Physica A*. – 2001. – V.298. – P. 237-254.

**Тези:**

1. *Стручаев А.И., Стручаев Н.И.* Оценка среднего размера жировых шариков гомогенизированного молока // *Дисперсные системы. XX научная конференция стран СНГ*, 23-27 сент. 2002 г., Одесса, Украина / *Тез. докл.* – Одесса: Астропринт, 2002. – С.252-253.
2. *Suslov A.V., Semenov K.I.* Interaction of high-temperature monodispersed metal particles with gases // *Abstr. Of 14<sup>th</sup> Annual meeting of the American Association for aerosol research*. – Pittsburgh, USA. – 1995. – P.37.

**Анотація.** передуюча тексту статті, пишеться на мові статті одним абзацом, розміром букв 12 pt, об'ємом 6–10 рядків. Анотації на інших мовах до тексту статті надаються після списку літератури. Анотаціям передують прізвища і ініціали авторів і назва статті. Після слова “АНОТАЦІЯ” або “SUMMARY” з абзаца друкується текст анотації.

## RULES FOR AUTHORS

### *Focus and scope:*

- evaporation, condensation, coagulation and electric charge of aerosols, mechanisms of their formation and transfer;
- combustion of aerodisperse systems;
- heat and mass transfer and gas-dynamic phenomena in dispersed systems with phase and chemical transformations;
- low-temperature plasma with condensed disperse phase

Material of the article should be presented in the following sequence:

- 1) UDC number;
- 2) the initials and surnames of the authors;
- 3) the name of the organization (s) presenting the article (if there are more than one organizations, each author's name is followed by a footnote (1, 2, etc.), and below all organizations, cities names, electronic mail from one of the authors;
- 4) the title of the article;
- 5) abstract;
- 6) text of the article;
- 7) references;
- 8) annotations in the two above-mentioned languages, other than the original language of the article, with the surnames and initials of the authors and the title of the article.

The size of the article, including drawings, literature, annotations, should not exceed 10 pages of text printed on the computer in 1 interval (with the size of letters 14 pt). Fields: left -20 mm, right 20 mm, top 20 mm, below 20 mm. The title of the article, authors' surnames and the name of the organization are printed in letters of size 14 pts on the line spacing between the UDC, the title of the article and the names of the authors of the 1.5 interval.

**Formulas:** 14-point font size. The size of the formulas is the same throughout the text. Indices in indices and power in power should be avoided. The sequential numbering of the formulas must be (1), (2), and so on. Greek letters and chemical formula are always straightforward. Vectors and matrices are typed in half-bold (the arrow above the vector is not used). Indices (Latin letters) are arranged in italics in formulas, with the exception of the words min, max, eff, as well as zero, which are typed in plain text. Also, functions such as  $\sin 2x$ ,  $\cos \omega t$  and so on are also typed in direct font.

**Tables.** Tables are numbered only if there is more than one. Indent to the table and after it - 2 intervals. If necessary, the table may have a title and a note.

**Illustrations.** Illustrations must be presented in the text of the paper as they are mentioned, in .pcx format or any common format. A corresponding signature must be printed under the drawing. Inscriptions that impede the perception of an illustration, should be replaced by digital or letter symbols and transferred to the text of the article or the signature under the figure. All designations in the drawing must correspond to the designations in the text. The numbering of the curves in the figure is from the top

down, from left to right. The size of the drawing should be not less than 50x50 mm and not more than 100x100 mm.

**References.** After the text of the article, after 2 intervals, a list of references used in the article, in the language of the original according to the model, is printed:

**Books:**

1. *Бабий В.И., Куваев Ю.Ф.* Горение угольной пыли и расчет пылеугольного факела. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 206с.

2. Основы практической теории горения: учебное пособие для вузов // *В.В. Померанцев, К.М. Арефьев, Д.Б. Ахметов и др.* // под ред. Померанцева. – Л.: Энергоатомиздат, 1986. – 312с.

**Articles:**

1. *Асланов С.К., Конейка П.И.* Об особенностях моделей детонационного спина в различных горючих средах. // Физика аэродисперсных систем. – 1971. – Вып. 5. – С.92-100.

2. *Флорко А.В., Золотко А.Н., Каминская Н.В., Шевчук В.Г.* Спектральные исследования горения частицы магния // Физика горения и взрыва. – 1982. – Т.18, №1. – С.17-22.

3. *Калинчук В.В.* Тепломассообмен и кинетика химических реакций углеродной частицы с газами // Вісник Одеськ. держ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 1999. – Т.4, вип.4. – С.12-16.

4. *Zatovsky A.V., Zvelindovsky A.V.* Hydrodynamic fluctuations of a liquid with anisotropic molecules // Physica A. – 2001. – V.298. – P. 237-254.

**Abstracts:**

1. *Стручаев А.И., Стручаев Н.И.* Оценка среднего размера жировых шариков гомогенизированного молока // Дисперсные системы. XX научная конференция стран СНГ, 23-27 сент.2002 г., Одесса, Украина / Тез. докл. – Одесса: Астропринт, 2002. – С.252-253.

2. *Suslov A.V., Semenov K.I.* Interaction of high-temperature monodispersed metal particles with gases // Abstr. Of 14th Annual meeting of the American Association for aerosol research. –Pittsburgh,USA. – 1995. – P.37.

**Наукове видання**

**ФІЗИКА  
АЕРОДИСПЕРСНИХ  
СИСТЕМ**

*Випуск 55*

*Науковий збірник*

*Російською, українською та англійською мовами*

Головний редактор **В.В. Калінчак**

Підписано до друку 12.12.2018. Формат 60x84/16.  
Умов.-друк. арк. 10.11. Тираж 100 прим.  
Зам. № 1858.

Надруковано з готового оригінал-макету

Видавець і виготовлювач  
Одеський національний університет  
імені І.І. Мечникова  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.

Україна, 65082, м. Одеса, вул. Єлісаветинська, 12  
Тел.: (048) 723 28 39. E-mail: druk@onu.edu.ua

